

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**MODELAGEM MATEMÁTICA DO ESCOAMENTO E DA
DISPERSÃO DE POLUENTES NA MICROESCALA
ATMOSFÉRICA**

TESE SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM ENGENHARIA
MECÂNICA

FERNANDO TADEU BOÇON

FLORIANÓPOLIS, JUNHO DE 1998

MODELAGEM MATEMÁTICA DO ESCOAMENTO E DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA MICROESCALA ATMOSFÉRICA

FERNANDO TADEU BOÇON

ESTA TESE FOI JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE **DOUTOR EM ENGENHARIA MECÂNICA**, ÁREA DE CONCENTRAÇÃO ENGENHARIA E CIÊNCIAS TÉRMICAS, E APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA.



Prof. CLOVIS RAIMUNDO MALISKA, Ph.D.
ORIENTADOR



Prof. JULIO CÉSAR PASSOS, Ph.D.
COORDENADOR DO CURSO

BANCA EXAMINADORA



Prof. CLOVIS RAIMUNDO MALISKA, Ph.D.



Prof. ANTONIO CESAR PINHO BRASIL JUNIOR, Dr. Ing.



Prof. ANTONIO FÁBIO CARVALHO DA SILVA, Dr. Eng.



Prof. CÉSAR JOSÉ DESCHAMPS, Ph.D.



Prof. NÍSIO CARVALHO LOBO BRUM, Dr. Eng.

Imagination is more important than knowledge.

Albert Einstein

A meus pais e a minha esposa.

Agradecimentos

Quero agradecer a todas as pessoas que direta ou indiretamente colaboraram para que este trabalho pudesse ser concluído. Agradeço ao Professor Dr. Clovis R. Maliska pelo empenho na orientação deste trabalho, pelo encorajamento, pela solicitude com que sempre me atendeu, pelas excelentes discussões que mantivemos desde a escolha do tema até o fechamento do trabalho e pelas disciplinas ministradas.

Aos Professores Dr. Brian Lamb e Dr. Dave E. Stock pela co-orientação deste trabalho e por todo o suporte prestado durante o período em que estive no Laboratory For Atmospheric Research da Washington State University (EUA).

Ao Professor Dr. Paulo C. S. Jucá (UFSC), pela colaboração na implementação das rotinas do k- ϵ , na busca e solução de *bugs* do programa e pelas discussões e sugestões. Ao Professor Carlos H. Marchi (UFPR) e ao colega doutorando Luciano A. Santos (UFSC) pelas excelentes discussões acerca do método de volumes finitos. Ao Professor Dr. Antônio Fábio C. Silva (UFSC) pela participação no exame de qualificação e pela colaboração na solução do problema de não conservação da massa. Ao Professor Dr. Francisco Marcondes (UFPB), pela amizade e pela colaboração na cessão das rotinas do *solver* GMRES. Ao Engenheiro Clovis Maliska Jr. que, através do programa ISO3D de sua criação, possibilitou a visualização dos resultados numéricos. Aos colegas do SINMEC, pela amizade e pelo convívio.

Aos professores integrantes da banca, por terem aceito participar na avaliação deste trabalho, pela paciência na leitura do manuscrito e pelas críticas e sugestões apresentadas. Aos professores do Departamento de Engenharia Mecânica de Universidade Federal do Paraná, pela cobertura de meus encargos didáticos enquanto estive afastado e pelo incentivo e apoio valiosos que me foram dispensados.

Aos amigos Fábio e Jade Magnani, e aos primos Luiz e Neroli Harmata, pela amizade e pelos tantos bons momentos que dividimos em Florianópolis.

Aos meus pais Tadeu e Sofia, que nunca mediram esforços em favor da minha educação, sem o que não poderia ter concluído o curso de Engenharia Mecânica. Ao meu irmão Fábio, pela

amizade e pelo companheirismo. Aos meus sogros Claudio e Eliana (*in memoriam*), pela amizade e pelo apoio incondicional.

A minha esposa Cassiana, pelo amor, dedicação e paciência ao longo desses anos, especialmente estes últimos, em que a necessidade de levar a cabo este trabalho privou-nos de muitas horas de convívio familiar.

Finalmente agradeço à CAPES, ao CNPq e a todos os contribuintes brasileiros pelo suporte financeiro, sem o qual este trabalho de doutoramento não seria possível.

SUMÁRIO

Epígrafe	iii
Dedicatória	iv
Agradecimentos	v
Sumário	vii
Lista de Símbolos	xi
Resumo	xv
Abstract	xvi

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	1
1.1 - A Poluição Ambiental	1
1.2 - Motivação	4
1.3 - Revisão Bibliográfica	6
1.3.1 - Modelos de Pluma Gaussiana	8
1.3.2 - Modelos Analíticos Não Gaussianos	12
1.3.3 - Modelos Numéricos	14
1.4 - Objetivos da Tese	25
1.5 - Organização da tese	28
 CAPÍTULO 2 - FORMULAÇÃO DO PROBLEMA	 30
2.1 - Considerações iniciais	30
2.2 - A Estabilidade Atmosférica	32
2.3 - Equações Governantes	33
2.3.1 - Equações da Mecânica dos Fluidos Para a Atmosfera	34
2.3.2 - A Equação da Concentração	40
2.4 - Tratamento da Turbulência	41
2.4.1 - O Modelo k- ϵ Isotrópico	48
2.4.2 - O Modelo k- ϵ Anisotrópico	52
2.5 - Efluentes Com Material Particulado	56
 CAPÍTULO 3 - TRATAMENTO DOS FENÔMENOS ATMOSFÉRICOS RELEVANTES	 60
3.1 - A Estabilidade Atmosférica	61
3.2 - A Camada Limite Atmosférica	63
3.3 - A Camada Superficial	66
3.4 - A Altura da Camada Limite Atmosférica	68

3.5 - O Comprimento de Monin-Obukhov	71
3.6 - Perfis de Velocidade e Temperatura na Camada Superficial	74
3.7 - A Rugosidade do Terreno	77
3.8 - Remoção Por Deposição Úmida	79
3.8.1 - Coeficiente de Deposição Úmida para Gases	79
3.8.2 - Coeficiente de Deposição Úmida para Particulados	81
3.9 - Remoção Por Deposição Seca	83
3.10 - Tratamento das Reações Químicas Importantes	86
3.10.1 - Cinética das Reações Químicas	88
 CAPÍTULO 4 - METODOLOGIA DE SOLUÇÃO	 91
4.1 - Características Gerais	92
4.2 - Transformação de Coordenadas	93
4.3 - Integração da Equação de Transporte de um Escalar	99
4.4 - Esquemas de Interpolação	101
4.4.1 - O Esquema WUDS	101
4.4.2 - O Esquema QUICK	103
4.5 - O Conjunto de Equações Discretizadas	105
4.6 - Arranjo das Variáveis na Malha	107
4.7 - O Acoplamento Pressão-Velocidade	108
4.8 - Solução dos Sistemas Lineares	111
4.9 - Controle do Avanço da Solução	112
4.10 - Algoritmo da Solução Numérica	113
4.11 - Critério de Convergência	113
4.12 - Tratamento do Termo Fonte	116
4.12.1 - Linearização do Termo Fonte para a Energia Cinética Turbulenta (k)	116
4.12.2 - Linearização do Termo Fonte para a Taxa de Dissipação da Energia Cinética Turbulenta (ϵ)	117
4.13 - Aplicação das Condições de Contorno	119
4.14 - Os Códigos Computacionais	120
4.15 - Geração das Malhas	122
 CAPÍTULO 5 - VALIDAÇÃO DO CÓDIGO COMPUTACIONAL	 124
5.1 - Escoamento Turbulento Entre Placas Paralelas	125
5.1.1 - Descrição do Problema	126
5.1.2 - Equações Governantes	126
5.1.3 - Condições de Contorno	127
5.1.4 - Solução Numérica	128
5.1.5 - Resultados	129
5.2 - Jato Plano	131
5.2.1 - Descrição do Problema	131
5.2.2 - Equações Governantes	132

5.2.3 - Condições de Contorno	132
5.2.4 - Solução Numérica	132
5.2.5 - Resultados	133
5.3 - Escoamento Sobre Askervein	138
5.3.1 - Descrição do Problema Simulado	138
5.3.2 - Equações Governantes	140
5.3.3 - Perfis de Velocidade e Turbulência na Entrada	140
5.3.4 - Condições de Contorno	141
5.3.5 - Solução Numérica	143
5.3.6 - Resultados	143
 CAPÍTULO 6 - DISPERSÃO EM TÚNEL DE VENTO	 150
6.1 - Descrição do Experimento em Túnel de Vento	151
6.2 - Descrição dos Problemas Simulados	153
6.3 - Equações Governantes	155
6.4 - Condições de Contorno	156
6.4.1 - Fronteira a Montante	156
6.4.2 - Fronteira Inferior	160
6.4.3 - Fronteiras Laterais e Superior	162
6.4.4 - Fronteira a Jusante	162
6.5 - Solução Numérica	163
6.5.1 - Malhas Empregadas	163
6.5.2 - Comparação QUICK x WUDS	167
6.5.3 - Índice de Convergência de Malha	175
6.6 - Resultados do Escoamento	181
6.7 - Resultados de Concentração	192
6.7.1 - Resultados Iniciais	192
6.7.2 - Tratamento da Difusividade Próximo da Fonte	196
6.7.3 - Resultados Finais	198
6.8 - Resumo do Capítulo	219
 CAPÍTULO 7 - DISPERSÃO EM CINDER CONE BUTTE	 221
7.1 - O Experimento de Campo	221
7.2 - O Problema Simulado	222
7.3 - Equações Governantes	224
7.4 - Condições de Contorno	226
7.4.1 - Fronteira a Montante	226
7.4.2 - Fronteira Inferior	228
7.4.3 - Fronteiras Laterais e Superior	230

7.4.4 - Fronteira a Jusante	230
7.5 - Solução Numérica	231
7.6 - Resultados do Escoamento	236
7.7 - Resultados de Concentração	250
7.8 - Resumo do Capítulo	261
 CAPÍTULO 8 - CONCLUSÃO	 262
8.1 - Perspectivas para Trabalhos Futuros	265
 APÊNDICE A - OBTENÇÃO DO MODELO $k-\varepsilon$ ANISOTRÓPICO	 267
 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	 274

Lista de Símbolos

A	matriz dos coeficientes do sistema de equações lineares
b_{ij}	tensor métrico da transformação de coordenadas
B	termo fonte do sistema de equações lineares
c	concentração mássica
c_i	concentração mássica da espécie i
C_p	calor específico a pressão constante
C_μ, C_{1s}, C_{2s}	constantes do modelo de turbulência
D, D_i	coeficiente de difusão mássica do poluente (i) na mistura ar mais poluentes
D_p	diâmetro do particulado
\tilde{D}_p	diâmetro dos hidrometeoros
$\frac{D}{Dt}$	derivada substancial $\left(\frac{\partial}{\partial t} + u_j \frac{\partial}{\partial x_j} \right)$
f	parâmetro de Coriolis ($= 2 \Omega \sin\phi$), parâmetro de proximidade do solo (eq. 2.71)
F	força de Coriolis
g	módulo da aceleração da gravidade
G	produção de energia cinética turbulenta por efeitos de empuxo
h	altura da camada limite atmosférica (CLA)
H	fluxo de calor na superfície
I	intensidade de radiação solar (eq. 3.20)
J	jacobiano da transformação de coordenadas
k	energia cinética turbulenta, constante de reação química
k_a	condutibilidade térmica do ar
k_B	constante de Boltzmann ($= 1,380622 \times 10^{-23} \text{ J / K}$)
k_v	constante de Von Karman ($= 0,4$)
k_t	condutibilidade térmica turbulenta
K	difusividade turbulenta
l	comprimento de escala da turbulência (comprimento de mistura)
L	comprimento de Monin-Obukhov (eq. 3.2)
$L []$	operador linearizador
M	massa, massa molecular
n	direção normal

N	número de equações do sistema linear, frequência de Brunt-Vaisalla (eq. 7.11)
$N()$	distribuição de tamanho da população de particulados
$\tilde{N}()$	distribuição de tamanho dos hidrometeoros
p	pressão
p_p	taxa de precipitação pluviométrica
P	produção de energia cinética turbulenta por cisalhamento
Pr	número de Prandtl
q	intensidade da fonte emissora
$Q()$	função probabilidade de transição
\vec{r}	vetor posição
r_a, r_s, r_t	resistências aerodinâmica, superficial e de transferência na deposição seca
R	constante dos gases ideais
R_i	termo de reação química da espécie i
S	termo fonte
Sc	número de Schmidt
S_t	número de Stokes
t	tempo
T	temperatura
\vec{u}	vetor velocidade
u_*	velocidade de fricção (eq. 2.59)
u_m	velocidade prescrita para a fronteira a montante
u, v, w	componentes cartesianas do vetor velocidade nas direções x, y, z
U_i	velocidade contravariante na direção ξ_i
U, V, W	velocidades contravariantes nas direções ξ, η, γ
v_d	velocidade de deposição seca
v_t	velocidade terminal para particulados
x_i	direção no sistema cartesiano de coordenadas ($x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$)
x, y, z	direções do sistema cartesiano de coordenadas
z_0	parâmetro de rugosidade do terreno

LETRAS GREGAS

β	coeficiente de expansão volumétrica
Γ	taxa adiabática de decréscimo vertical da temperatura na atmosfera

Γ_{ij}	tensor dos coeficientes de transporte difusivo (eq. 4.2)
χ_i	concentração volumétrica da espécie i
ε	taxa de dissipação da energia cinética turbulenta
λ	livre caminho médio das moléculas no ar
$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$	constantes do modelo de turbulência
σ_y, σ_z	coeficientes de dispersão horizontal de vertical do modelo Gaussiano
τ	tensão cizalhante
τ_{ij}	tensor de Reynolds
ρ	massa específica
ξ, η, γ	direções no sistema curvilíneo de coordenadas
γ	constante adiabática do ar ($\cong 1,4$)
ξ_i	direção no sistema curvilíneo de coordenadas ($\xi_1 = \xi, \xi_2 = \eta, \xi_3 = \gamma$)
ϕ	propriedade genérica
ϕ_m, Ψ_m, Ψ_h	funções para o perfil de velocidade e temperatura na camada superficial, (equações 3.10, 3.11, 3.13, 3.14, 3.15 e 3.19)
φ	latitude
Λ	coeficiente de remoção úmida
μ	viscosidade absoluta do fluido
μ_e	viscosidade efetiva do modelo de turbulência
ν	viscosidade cinemática do fluido
θ	temperatura potencial
Ω	velocidade angular da Terra

SUBSCRITOS

a	ar
e	estado de equilíbrio ou referência
p	particulado, referente aos volumes adjacentes a fronteiras sólidas
t	turbulento
0	ao nível do solo
w	referente à parede (<i>wall</i>)

SOBRESCRITOS

ϕ	referente à propriedade ϕ
\sim	perturbação em relação ao estado de equilíbrio
'	flutuação instantânea da propriedade (em escoamento turbulento), termo de correção no processo iterativo (eq. 4.33)
—	média temporal da propriedade (em escoamento turbulento)
\wedge	transformado para o sistema curvilíneo de coordenadas
\rightarrow	vetor
\equiv	tensor de 2ª ordem
0	referente ao passo de tempo anterior
•	derivada em relação ao tempo
*	referente à iteração anterior
t	referente ao tempo t

Resumo

A determinação dos campos de concentração de poluentes lançados na atmosfera é um elemento importante na previsão de impactos ambientais causados por emissões de efluentes industriais. Na solução da equação da concentração para poluentes gasosos e material particulado, é necessário conhecer-se da maneira mais realista possível o campo de velocidade e os níveis de turbulência do escoamento na camada limite atmosférica. Um modelo matemático tridimensional baseado nas equações da mecânica dos fluidos juntamente com uma variante não isotrópica do modelo de turbulência $k-\varepsilon$ são utilizados para o cálculo do escoamento e da dispersão de substâncias na microescala atmosférica (distâncias da ordem de alguns km). O modelo é implementado em um código computacional tridimensional utilizando o método numérico dos volumes finitos em coordenadas curvilíneas generalizadas. Para que a modelagem matemática da dispersão na atmosfera forneça bons resultados é necessário que esta leve em conta os fenômenos atmosféricos importantes que influenciam a dispersão dos poluentes, bem como a topografia do terreno. Assim o modelo permite incorporar, através de condições de contorno e termos fontes nas equações governantes, fenômenos relevantes ao problema como a estabilidade atmosférica (estratificação térmica), a altura da camada de mistura e a rugosidade do terreno. O modelo também permite a incorporação de processos físicos de remoção, como a deposição seca e a úmida (lavagem por chuvas), a remoção química de poluentes primários e formação de poluentes secundários. Esses processos de remoção e reações químicas são considerados mas não simulados na tese.

O modelo é aplicado a diversos casos de escoamento e dispersão em túnel de vento, sob condições de estratificação neutra e estável, sobre três topografias tridimensionais idealizadas. Comparações com resultados experimentais demonstram que o modelo anisotrópico de turbulência tem melhor habilidade de prever a dispersão da pluma do que o $k-\varepsilon$ clássico, especialmente no caso de escoamento estavelmente estratificado, em que o caráter não isotrópico da turbulência é relevante. Um tratamento especial para as difusividades turbulentas próximo da fonte é proposto, já que em seu estágio inicial o tamanho da pluma é menor que o comprimento de escala da turbulência do escoamento desenvolvido.

Também foi simulado numericamente um experimento de dispersão em escala real realizado em Cinder Cone Butte (EUA), sob atmosfera estável (classe E). Os resultados numéricos mostram que o trajeto da pluma é adequadamente previsto pelo modelo numérico, enquanto que as concentrações são superestimadas devido às grandes variações na direção do vento durante a hora do experimento, o que provocou uma maior dispersão da pluma real.

Abstract

The prediction of the concentration fields of pollutants released to the atmosphere is a key factor in assessing possible environmental damages caused by industrial emissions. To solve the concentration equation for gaseous or particulate effluents it is necessary to know as accurately as possible the velocity field and turbulence intensities at the atmospheric boundary layer in the region of interest. A three dimensional mathematical model based on the equations of fluid mechanics along with a modified non isotropic k - ϵ turbulence model are employed to calculate the flow and dispersion at the atmospheric microscale (distances of the order of kilometers). The model is implemented in a three dimensional computational code based on the finite volume method using body fitted coordinates. In order to obtain more realistic results from the mathematical model, it is necessary to consider important phenomena related to the dispersion in the atmospheric boundary layer, and the terrain topography, as well. Through the boundary conditions and source terms of the governing equations, the model is capable to consider the atmospheric stability (thermal stratification), the height of the mixing layer and the terrain roughness. It is also possible to incorporate physical processes of pollutant removal, such as dry and wet deposition (washout), chemical removal of primary pollutants and formation of secondary ones. These removal and chemical processes are considered but not simulated in the thesis.

The model is applied to simulate several cases of flow and dispersion wind tunnel experiments under neutral and stable stratification, over three idealized topographies (axisimetric hills). Comparisons against experimental results show that the non isotropic turbulence model has better ability to foresee the plume dispersion than the standard k - ϵ , specially in the case of stably stratified flows, in which the non isotropic character of turbulence is relevant. A special treatment is proposed to the eddy diffusivities near the source, where the plume width is smaller than the characteristic turbulence length scale of the flow.

It was also numerically simulated a full scale dispersion experiment which was conducted over Cinder Cone Butte (USA), under stable atmosphere (class E). The computational results show that the plume path is correctly predicted by the numerical model, while concentrations are overestimated because of large changes in wind direction during the experiment hour, which caused a larger dispersion of the actual plume.

CAPÍTULO UM - INTRODUÇÃO

1.1 - A Poluição Ambiental

A melhoria das condições de vida da população no planeta, que cresce em progressão geométrica acentuada, invariavelmente pressupõe o desenvolvimento da agropecuária, do comércio e da indústria em níveis cada vez mais elevados de modo a atender a demanda de produtos e serviços que cresce também em progressão geométrica.

Da produção de bens e serviços, na maioria dos casos, resultam também subprodutos dos processos de fabricação que podem ou não ser reaproveitados. Quando a sua reutilização no processo produtivo não é possível, ou não é viável economicamente, faz-se então necessário livrar-se desses resíduos, lançando-os em meio sólido (o solo), líquido (rios, lagos, mares, oceanos), ou gasoso (a atmosfera) do planeta.

A presença nesses meios de substâncias nocivas (resíduos sólidos, líquidos e gasosos) em quantidade tal que possa afetar o seu equilíbrio natural e prejudicar a vida na Terra constitui o que se denomina de poluição. O meio ambiente é capaz, através de mecanismos naturais, de receber e processar uma grande quantidade desses resíduos de origem antropogênica de modo que estes não se tornem poluentes.

Mais recentemente neste século, entretanto, a quantidade de substâncias potencialmente poluentes emitidas em certas regiões da Terra é superior àquela que o meio ambiente local é capaz de suportar, resultando então em poluição dessas áreas, que se vêem então diante dos problemas da poluição ambiental. Muitas vezes os efeitos nocivos de certas substâncias, principalmente aquelas presentes em pequenas concentrações, só são detectados a longo prazo, muitas após vários anos, o que dificulta a tarefa de definir que substâncias e a partir de que concentração devam ser classificadas como poluentes. Mais exatamente, é o efeito cumulativo da exposição a poluentes tóxicos que provoca danos às espécies animais e vegetais. Por exemplo, alta concentração por curto intervalo de tempo ou baixas concentrações durante longos períodos.

Voltemos agora nossa atenção para um grande meio receptor de resíduos das atividades humanas, a atmosfera. A poluição ou contaminação do ar é provocada principalmente por três tipos de emissões:

- a) Gases resultantes da combustão nos motores de veículos automotores, que contêm óxidos de nitrogênio, monóxido e dióxido de carbono, dióxido de enxofre, derivados de hidrocarbonetos, responsáveis por 40% da poluição atmosférica nas grandes cidades;
- b) Gases e material particulado lançados pelas chaminés de indústrias químicas, siderúrgicas, fábricas de cimento e papel, termelétricas e refinarias de petróleo, contendo as mais variadas espécies químicas;
- c) Queimadas e incineração de lixo doméstico e industrial, responsáveis pela emissão de fumaça contendo misturas de gases com as mais variadas composições químicas.

Embora não seja um consenso na comunidade científica, a maioria dos pesquisadores do assunto acredita que a poluição da atmosfera é a principal causa do "efeito estufa" (via dióxido de carbono) e do fenômeno de "chuvas ácidas" (via óxidos de nitrogênio e enxofre). Com relação aos seres humanos, a presença de substâncias tóxicas no ar provoca distúrbios respiratórios, alergia e lesões degenerativas no sistema nervoso e em órgãos vitais, e até o câncer. Esses problemas tornam-se mais críticos durante o inverno, quando a ocorrência de inversões térmicas é mais frequente. Durante uma inversão os poluentes ficam aprisionados numa região próxima ao solo, em uma camada de ar estável altamente estratificada que dificulta a dispersão, aumentando

sensivelmente a concentração dos contaminantes. Este fenômeno é comum em manhãs frias de inverno com pouco vento e muitas nuvens.

O combate ao problema da poluição do ar, de uma maneira geral, pode ser feito através de:

- redução na quantidade das emissões;
- tratamento dos efluentes antes da emissão;
- reposicionamento das fontes emissoras.

O primeiro, simples redução das emissões, muitas vezes é imperativo, especialmente em casos extremos de regiões altamente poluídas, onde simplesmente proíbe-se a instalação de novas fontes de poluentes, ou estabelecem-se planos de redução progressiva das emissões. Percebe-se que se torna inadequado simplesmente proibir-se a instalação de uma nova indústria em um determinado local baseado no fato desta gerar resíduos poluentes, pois deve-se levar em consideração também os benefícios que esta deverá proporcionar, os quais não são limitados só à região em que se encontra a indústria.

Lança-se mão então dos recursos de tratamento dos efluentes antes de descarrega-los na atmosfera. Obviamente, qualquer processo de tratamento, desde simples filtros até complexas plantas químicas com vários equipamentos, terão custos de implantação, operação e manutenção que ao final incidirão sobre o custo do produto fabricado, encarecendo-o. Neste caso esse é o preço que se paga para não se deixar de dispor deste ou daquele produto ou serviço e de outros benefícios advindos daquela atividade industrial e ao mesmo tempo garantir aceitável qualidade do ar na região.

Com relação a uma fonte ou um grupo de fontes de poluentes, quando não é possível nem a redução das quantidades emitidas nem o melhor tratamento dos rejeitos, resta então reposicionar essas fontes para um local onde os níveis de poluição por elas causados sejam aceitáveis. Muitos casos destes já ocorreram em centros urbanos que, à medida em que foram crescendo, tiveram de remover indústrias para áreas cada vez mais afastadas de seus centros.

O simples fato de se afastar grandes fontes poluidoras dos centros urbanos não garante a solução do problema uma vez que as condições atmosféricas locais podem fazer com que os

contaminantes sejam trazidos de volta. Percebe-se então a necessidade de fazer-se todo um estudo prévio do problema para então poder sugerir possíveis alternativas de solução.

O monitoramento da qualidade do ar, embora não atue diretamente no combate à poluição, tem papel indispensável como fornecedor de dados para a avaliação da qualidade baseado nos níveis de concentração de poluentes medidos em campo. Também esses dados, quando devidamente processados e documentados, são extremamente úteis para a validação de modelos experimentais ou teóricos, ou mesmo para a construção de modelos matemáticos estatísticos.

1.2 - Motivação

Como mencionado na seção anterior, o posicionamento de uma fonte emissora de poluentes requer um estudo dos impactos ambientais causados à região de influência da mesma. Várias regulamentações requerem um relatório de impacto ambiental das descargas regulares de produtos químicos provindos de novas ou modificadas fontes de emissão, dos impactos relacionados a descargas acidentais e do risco residual associado a emissões de produtos tóxicos após a instalação do sistema de tratamento ou controle requerido.

Voltando a atenção às descargas de poluentes na atmosfera, a determinação quantitativa desses impactos sobre a qualidade do ar deve relacionar as concentrações dos contaminantes a jusante (com relação à direção do vento) da fonte emissora com as taxas de emissão. Em se tratando de estudos prévios à instalação, estes só podem ser feitos através de experimentos, utilizando modelos físicos, ou teoricamente, utilizando modelos matemáticos. Ambas as maneiras possuem suas vantagens, sendo que para o caso de descargas na atmosfera as duas técnicas são utilizadas.

Quando a topografia da região é suficientemente plana, modelos matemáticos simples, que carregam inúmeras correlações empíricas, podem ser empregados porque a precisão de seus resultados é satisfatória. Muitos modelos matemáticos analíticos são aceitos por instituições

oficiais responsáveis pelo meio ambiente, como a EPA (Environmental Protection Agency) dos EUA, para fins de regulamentação. No caso de regiões com topografia complexa (colinas, montanhas ou vales) esses modelos matemáticos simples já não produzem resultados satisfatórios. Neste caso, os experimentos feitos em laboratório, utilizando túnel de vento e um modelo físico em escala reduzida, são mais comuns para fins de regulamentação ambiental.

Percebe-se que nos últimos 10 anos tem se intensificado o desenvolvimento de modelos matemáticos mais complexos, capazes de considerar topografias irregulares bem como diversos fenômenos físicos e químicos envolvidos no processo de dispersão atmosférica. Entende-se que isso se deve ao crescente aumento da capacidade computacional, aliada à contínua diminuição dos preços dos computadores. A isso também poderíamos acrescentar as grandes dificuldades de se reproduzir em laboratório, num modelo em escala muito reduzida, a maioria das condições presentes na atmosfera real. Desta forma os resultados obtidos para situações reproduzidas nos experimentos em escala reduzida são questionáveis, pois só se consegue simular no modelo reduzido uma parte dos fenômenos presentes no problema real. Embora modelos matemáticos, mesmo os mais complexos, também sofram limitações semelhantes, o custo de uma simulação em computador já é mais barata e será cada vez mais, à medida em que os seus custos prosseguem em marcha descendente. O que ainda falta são modelos matemáticos que consigam representar bem os complexos fenômenos envolvidos nos problemas atmosféricos reais. Os modelos físicos e os experimentos de campo em escala real continuam indispensáveis para o estudo desses fenômenos, visando o aperfeiçoamento dos modelos matemáticos e a sua validação.

A modelagem da dispersão na atmosférica, que é como chamaremos daqui para frente a modelagem matemática da qualidade do ar, é mais valiosa para a indústria quando utilizada progressivamente como uma ferramenta de gerenciamento do que em resposta a restrições regulamentares (Seigneur, 1992). Por exemplo, a modelagem da poluição do ar pode ser usada para:

- Projetar uma fábrica de modo a minimizar os impactos da descarga, selecionando adequadamente altura e posição das chaminés;
- Planejar programas de redução das emissões, por exemplo determinando quais fontes e químicos contribuem em maior parte para os riscos previstos para a saúde pública;

- Planejar medidas de prevenção e diminuição de danos para minimizar as consequências de descargas acidentais de grandes quantidades de materiais tóxicos.

Desta forma, a previsão dos níveis de concentração de poluentes é um requisito indispensável para determinar possíveis danos a serem provocados por novas fontes ou mesmo por fontes existentes a serem modificadas. Neste âmbito, a modelagem matemática é uma ferramenta importante para a obtenção (cálculo) dessas previsões.

Cientes da crescente importância atribuída nos últimos anos aos problemas relacionados ao meio ambiente em nível mundial, bem como da necessidade de se desenvolver, no Brasil, estudos mais profundos com relação à previsão da dispersão de poluentes na atmosfera, sentimo-nos então motivados a realizar o trabalho que ora apresentamos. A seguir é feita a revisão bibliográfica para então, na seção 1.4, apresentarmos os objetivos desse trabalho.

1.3 - Revisão Bibliográfica

Os primeiros estudos da dispersão de substâncias na atmosfera datam das primeiras décadas deste século, como os trabalhos de Richardson (1925, 1926), Taylor (1921, 1960), Rossby (1932), Bosanquet e Pearson (1936), Hewson (1945) e Baron et al (1949). Sutton (1932) publicou um trabalho apresentando uma teoria para a difusão turbulenta na atmosfera. Também Sutton (1947a, 1947b, 1950) estudou o problema da difusão na baixa atmosfera a partir de fontes contínuas pontuais (chaminés) e de linha, considerando também gases quentes, em que era assumida uma distribuição gaussiana da concentração a partir da linha de centro da pluma. Segundo Pasquill (1962), Frenkiel (1952) parece ter sido o primeiro a apresentar a equação para as concentrações $c=c(x,y,z,t)$ para uma fonte pontual instantânea ("puff"), também assumindo distribuição gaussiana nas direções transversais à do vento.

Há dois modos de abordar o problema da dispersão de poluentes: o teórico (utilizando-se modelos matemáticos) e o experimental (através de modelos físicos ou estudos de campo).

Os estudos experimentais em laboratório utilizam um modelo físico da região de interesse, construído em escala reduzida, que é colocado em um túnel de vento ou em um canal hidráulico para a simulação. Um fluido traçador representa o poluente e amostras são coletadas em diversos pontos do modelo para posterior análise da concentração. Escoamentos neutros ou estratificados podem ser simulados. Em túnel de vento a estratificação (variação vertical da densidade do escoamento principal) é obtida mediante aquecimento ou resfriamento da parede inferior (solo). Em canais hidráulicos a estratificação é conseguida pela adição de um sal em concentração variável na direção vertical, de acordo com o perfil de densidade desejado.

Dentre os trabalhos que utilizam modelos físicos tem-se os de Melbourne (1968), Teunissen (1983), Schatzman et al (1987), Petersen e Ratcliff (1989) e Kitabayashi (1991). Todos utilizaram túnel de vento na simulação experimental. Temos também o trabalho de Giovannoni (1987) que estudou em laboratório o efeito da ilha de calor, que se aplica para avaliar a influência dos grandes centros urbanos sobre a meteorologia da região.

Ohba (1990) conduziu experimentos em túnel de vento para investigar o escoamento de ar e a dispersão de gás em ambiente neutro e estavelmente estratificado sobre terreno complexo, usando como modelo de terreno, o de Steptoe Butte (uma colina isolada de aproximadamente 300m de altura no estado de Washington, EUA, na qual foram realizados experimentos de dispersão por Lamb et al, 1984). Os resultados do experimento para a concentração do gás traçador foram superpostos utilizando distribuições de probabilidade para a direção e velocidade do vento, bem como para a estabilidade atmosférica observados em Steptoe Butte, a fim de comparar os resultados de túnel de vento com os de campo. A aplicação do método de superposição produziu melhor concordância com os resultados de campo do que o método usual, sem superposição.

A abordagem teórica utiliza modelos matemáticos para descrever o campo de concentração a partir de dados da fonte emissora e das condições meteorológicas. Muitos desses modelos baseiam-se em distribuições estatísticas e necessitam de dados experimentais para que as suas constantes sejam determinadas. A seguir descreveremos os principais modelos encontrados na literatura, sem nos preocuparmos em descrever seus detalhes, uma vez que a literatura é rica nesse aspecto, especialmente no caso dos modelos analíticos.

1.3.1 - Modelos de Pluma Gaussiana

Os modelos de pluma gaussiana consideram que a concentração do poluente assume uma distribuição normal, com pico de concentração ao longo da linha de centro da pluma, uma dispersão σ_y na direção horizontal e σ_z na vertical conforme figura 1.1.

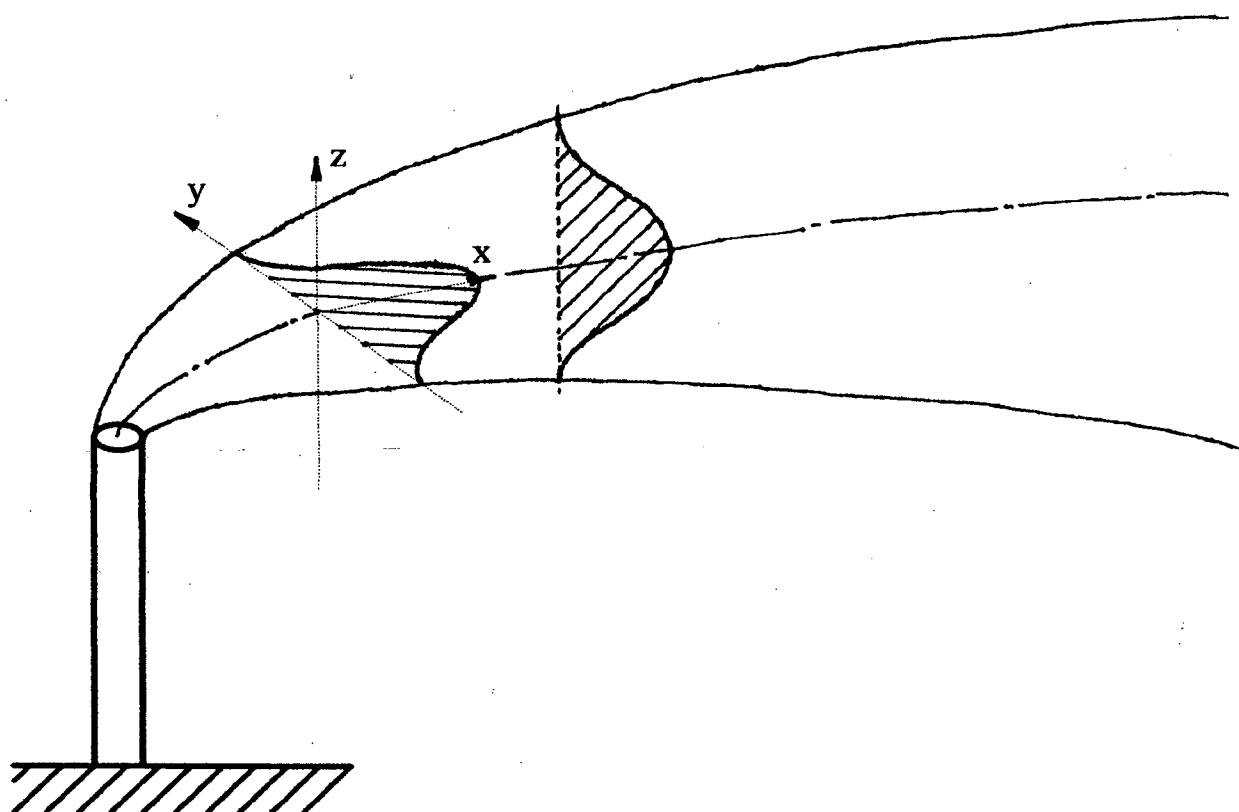


Figura 1.1 - Modelo de pluma gaussiana

As hipóteses adotadas neste caso são:

- Terreno plano, sem obstáculos a jusante da fonte;
- Velocidade unidirecional e constante do vento;
- Condições homogêneas e estacionárias de turbulência atmosférica.

A primeira hipótese muitas vezes pode ser adotada sem hesitação, é claro, quando a topografia da região é plana, ou próxima disso. A segunda hipótese já é bastante questionável, já que a velocidade do vento varia com a altura, especialmente nas proximidades do solo, onde gradientes verticais significativos são sempre verificados. Com relação à turbulência atmosférica, esta é um fenômeno muito complexo e nada se pode garantir sobre a sua homogeneidade, quer dizer, coeficientes de difusão turbulenta constantes (Panofsky e Dutton, 1984, Seinfeld, 1986).

As equações de concentração do modelo gaussiano são soluções analíticas da equação de conservação de uma espécie química sob certas hipóteses simplificativas, as quais reduzem a equação diferencial a uma forma mais simples e que possui solução analítica. No caso das três hipóteses acima citadas, e ainda desprezando a difusão (molecular e turbulenta) na direção do vento e considerando que não haja reações químicas no processo, a equação da concentração de um gás emitido a partir de uma fonte contínua pontual em regime permanente reduz-se a

$$u \frac{\partial c}{\partial x} = K_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + S \quad (1.1)$$

que sujeita às condições de contorno

$$\left. \frac{\partial c}{\partial z} \right|_{z=0} = 0 \quad (\text{reflexão total do solo})$$

$$S = q \delta(x) \delta(y) \delta(z - h) \quad (\text{fonte contínua pontual de intensidade } q \text{ a uma altura } h) \quad (1.2)$$

$$c \rightarrow 0 \text{ quando } x, z \rightarrow \infty \text{ e } y \rightarrow \pm\infty$$

tem como solução

$$c(x, y, z) = \frac{q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(\frac{-y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left[\exp\left(-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right] \quad (1.3)$$

onde

$$\sigma_y^2 = 2 K_y t = 2 K_y \frac{x}{u} \quad \text{e} \quad \sigma_z^2 = 2 K_z t = 2 K_z \frac{x}{u} \quad (1.4)$$

A obtenção das equações de concentração segundo o modelo de pluma gaussiana para diversas condições de contorno são apresentadas por Seinfeld (1986), Cap. 14. O principal problemas desses modelos simples recai na determinação dos parâmetros de dispersão - usualmente designados σ_x , σ_y , σ_z - que dependem das condições de estabilidade atmosférica, do vento e da turbulência. Várias fórmulas para a estimativa dos parâmetros de dispersão foram sugeridas a partir de extensos estudos de campo, como por exemplo as propostas por Bosanquet e Pearson (1936), Sutton (1947a, 1947b), Gifford (1961), Klug (1969) e ASME (1973).

Reconhecendo a necessidade de uma forma prontamente usável para definir a estabilidade atmosférica baseada em observações meteorológicas rotineiras (como velocidade do vento, intensidade de radiação solar e cobertura de nuvens), Pasquill (1961) propôs o conceito de classes de estabilidade, que provaram ser muito úteis nos cálculos de dispersão atmosférica que utilizam o modelo de pluma gaussiana. Baseado nas classes de estabilidade de Pasquill, Gifford (1961) desenvolveu as correlações mais largamente utilizadas para determinar os coeficientes de dispersão, conhecidas como as curvas de Pasquill-Gifford que relacionam σ_y e σ_z (coeficientes de dispersão horizontal e vertical respectivamente) com a distância da fonte e com a classe de estabilidade.

Como já foi mencionado, as condições para que as equações de pluma gaussiana sejam válidas são bastante idealizadas e portanto não deveria ser esperado que estas fossem aplicáveis a muitas situações reais. No entanto, devido a sua simplicidade, as equações de pluma gaussiana têm sido amplamente aplicadas (Seinfeld, 1986), como prevê a Agência de Proteção Ambiental dos EUA (EPA). A justificativa para essa utilização é a de que os parâmetros de dispersão (σ_y e σ_z) usados são obtidos a partir de concentrações medidas em experimentos de dispersão atmosférica reais. E mais, quando as flutuações na direção e velocidade do vento podem ser medidas em campo é possível determinar σ_y e σ_z para essas condições locais, o que resulta em melhores resultados já que se está automaticamente levando em consideração os efeitos de rugosidade do terreno local, turbulência e estabilidade atmosférica.

No caso de não se dispor de dados meteorológicos locais, a estimativa dos parâmetros de dispersão deve então ser feita a partir de parametrizações disponíveis na literatura. Neste caso deve-se escolher aquelas em que o conjunto de condições para as quais os parâmetros foram previstos mais se aproximem do caso em estudo. Para tal, diversos trabalhos foram publicados, dentre os quais se destacam o de Briggs (1974) (também mostrado por Panofsky, 1984, cap. 10), Gifford (1976), Weber (1976), AMS Workshop (1977), Doran et al (1978), Sedefian e Bennett (1980) e Hanna et al (1982).

Um dado de entrada importante para o cálculo da dispersão nos modelos gaussianos é a altura efetiva de emissão, que é a soma da altura física da chaminé e a altura de elevação da pluma antes de tomar a direção do vento. Esta segunda deve incorporar os efeitos de quantidade de movimento vertical, devido à velocidade de saída do jato, e de empuxo, no caso de gases lançados à temperatura diferente daquela do ar na descarga. Várias equações foram propostas para estimar a elevação da pluma. Dentre elas destacam-se as fórmulas propostas por Briggs (1969, 1971, 1974) e pela ASME (1973). A caracterização da elevação da pluma em termos das condições de lançamento dos gases e da atmosfera no local de emissão constitui um problema complexo que para ser mais detalhadamente resolvido envolve a solução acoplada das equações de conservação da massa, quantidade de movimento e energia para resolver o escoamento do jato descarregado na atmosfera. Como nos modelos de pluma gaussiana isto não é feito e apenas são adotadas estimativas baseadas em casos reais estudados, esta simplificação é mais uma fonte de erros no modelo.

Estudos têm sido feitos para estender o modelo gaussiano para incorporar efeitos não considerados na abordagem tradicional. Andrén (1987) propôs uma forma combinada em que a difusão vertical é prevista por um modelo de turbulência de primeira ordem e a difusão lateral tem perfil gaussiano e permite considerar a rugosidade do terreno. O trabalho de Lott (1984) avalia a capacidade do modelo de pluma gaussiana para simular dispersão a partir de várias fontes. Um interessante modelo tridimensional analítico para a dispersão de gases e particulados foi apresentado por Llewelyn (1983) e outro semelhante por Lee (1985) que podem ser considerados modelos gaussianos (por considerarem as difusividades constantes), mas que permitem considerar a velocidade terminal, em caso de material particulado, e também um mecanismo de remoção de primeira ordem, o qual pode ser uma reação química simples ou deposição úmida (lavagem por chuvas).

Alam e Seinfeld (1981) obtiveram soluções analíticas para a equação da concentração (1.1), em regime permanente (com coeficientes de difusão constantes) para o cálculo da dispersão de SO_2 que permite levar em consideração mecanismos de primeira ordem (linear) de conversão de gás para particulado bem como deposição seca e úmida. Na equação para o particulado, porém, a deposição por gravidade foi desprezada. O modelo também permite considerar a presença de uma camada de inversão elevada.

Mais recentemente, Andretta et al (1993) apresentaram o modelo MRBT, baseado na solução analítica transiente da equação da concentração (equação 1.1 com o termo transiente) numa altura de mistura finita (h), com reflexão total (difusão nula) em $z = 0$ e $z = h$, em que no termo fonte também é possível prescrever um mecanismo de remoção de primeira ordem, e as difusividades turbulentas são consideradas constantes.

Após esta breve revisão dos modelos de pluma gaussiana podemos perceber que apesar de apresentar inúmeras variações, todos têm em comum o fato de considerarem constantes os coeficientes de dispersão (difusividade turbulenta) nas três direções.

1.3.2 - Modelos Analíticos Não Gaussianos

Embora os modelos de pluma gaussiana sejam amplamente utilizados (e quando bem aplicados fornecem bons resultados) a sua inabilidade em incluir variações da velocidade do vento com a altura e não homogeneidades nas condições de turbulência torna-os inadequados em muitos casos. Embora a distribuição lateral da concentração, bem como a distribuição vertical no caso de fontes elevadas (altas chaminés), seja geralmente gaussiana, a distribuição vertical para fontes ao nível do solo definitivamente não é, como frisa Panofsky (1984), cap. 10. Para poder melhor considerar os efeitos da variação da velocidade do vento e da difusão turbulenta na atmosfera foram desenvolvidos modelos baseados na solução analítica da equação da concentração.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} c = \vec{\nabla} \cdot (\vec{K} \cdot \vec{\nabla} c) + S \quad (1.5)$$

Como soluções analíticas não existem para a equação completa na sua forma tridimensional, hipóteses foram feitas a fim de simplificá-la, tornando possíveis algumas soluções analíticas. Neste ponto cabe ressaltar que as equações de concentração do modelo de pluma gaussiana podem ser obtidos da solução de (1.5), simplificada o bastante de acordo com as hipóteses do modelo.

A idéia nos modelos analíticos não gaussianos é a de prescrever a velocidade do vento como função da altura ($u = u(z)$) enquanto que v e w continuam nulas, bem como assumir uma variação do coeficiente de difusão vertical com a altura ($K_z = K_z(z)$). A vantagem disso é a de manter a simplicidade dos modelos gaussianos enquanto teoricamente ser capaz de representar a não homogeneidade vertical da atmosfera. Para tal, no entanto, é necessário determinar a variação da velocidade e da difusividade vertical com a altura de acordo com parâmetros meteorológicos, como a estabilidade atmosférica, a altura da camada de inversão, a velocidade de fricção ($u_* = \sqrt{\tau_0 / \rho}$) e o parâmetro de Coriolis. Neste sentido temos os trabalhos de Lamb et al (1975), Lamb e Duran (1977), Myrup e Ranzieri (1976), O'Brien (1970) e Bussinger e Arya (1974), os quais fornecem expressões para a variação da difusividade vertical. Com relação à velocidade do vento, em condições de estabilidade neutra, o perfil de velocidade na camada limite atmosférica é aproximadamente logarítmico, como apresentado por Seinfeld (1986), cap. 12. Para atmosferas não neutras, Benoit (1977) apresenta perfis de velocidade para casos de estratificação estável e instável em função do comprimento de Monin-Obukhov (o grau de estabilidade ou instabilidade atmosférica), da velocidade de fricção e da rugosidade do terreno.

Embora todas as expressões presentes nesses trabalhos para cálculo da variação da difusividade vertical e da velocidade do vento tenham razoável concordância com os dados experimentais para terreno plano, geralmente são de forma demasiado complexa e quando a sua direta inserção na equação da concentração é feita, não é possível obter-se uma solução analítica. Aproximações dos perfis devem então ser feitas com expressões mais simples para permitir a obtenção de soluções exatas. Estão na literatura diversas soluções para (1.5) com

$$u(z) = a z^p \quad (1.6)$$

$$K_z(z) = b z^n \quad (1.7)$$

e diferentes condições de contorno. Entre elas está a solução bidimensional de Demuth (1978), que considera um altura de dispersão limitada por uma camada de inversão, e a de Huang (1979), que é tridimensional mas onde a altura para dispersão é ilimitada. Uma combinação dessas duas soluções foi utilizada por Tirabassi et al (1986) em seu modelo de dispersão KAPPAG. Uma breve revisão dos modelos analíticos não gaussianos foi feita por Tirabassi (1989).

É importante notar que apesar de mais sofisticados que os modelos gaussianos, os modelos analíticos não gaussianos dividem algumas limitações com os primeiros, quais sejam as de serem aplicáveis para casos de terrenos planos, escoamento atmosférico unidimensional, difusividade turbulenta lateral constante e não existência de mecanismos de remoção ou reações químicas não lineares, ou mesmo lineares mas com acoplamento entre as equações das espécies.

1.3.3 - Modelos Numéricos

Para suplantar as limitações impostas pelas hipóteses simplificativas requeridas pelos modelos analíticos, a saída é procurar modelos mais genéricos baseados na solução da equação da concentração (1.5) em sua forma bi ou tridimensional completa, em que as difusividades turbulentas e as componentes da velocidade sejam funções do espaço e, possivelmente, do tempo. O campo de velocidades, presente nos termos convectivos da equação de concentração, neste caso também deve ser resolvido de forma completa (solução das equações de Navier-Stokes).

Duas abordagens podem ser empregadas para a descrição do transporte de uma propriedade escalar: a Euleriana e a Lagrangeana. O abordagem Euleriana é baseada no balanço de conservação da propriedade (massa no caso de dispersão de uma espécie química) sobre um volume infinitesimal fixo no espaço. A abordagem Lagrangeana baseia-se em acompanhar o deslocamento de uma partícula de fluido e a variação em suas propriedades. Por partícula de

fluido entendemos um volume que é grande quando comparado com dimensões moleculares, mas pequeno o suficiente para se comportar como um ponto que segue o escoamento, ou seja, de dimensões muito menores que as dimensões características deste. Ambas as abordagens apresentam dificuldades matemáticas que não permitem uma solução exata para a concentração média (de material particulado ou gases) no escoamento turbulento (Seinfeld, 1986).

A equação fundamental para a concentração média no método Euleriano é a equação (1.5), exatamente a equação de transporte para a espécie química em consideração. O termo fonte engloba emissões, remoções e reações químicas. No método Lagrangeano a equação fundamental para a concentração média é (Seinfeld, 1986, Cap.13).

$$c(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(\vec{r}, t | \vec{r}_0, t_0) c(\vec{r}_0, t_0) d\vec{r}_0 + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{t_0}^t Q(\vec{r}, t | \vec{r}', t') S(\vec{r}', t') dt' d\vec{r}' \quad (1.8)$$

O primeiro termo do segundo membro representa a influência das partículas presentes no tempo anterior (t_0) e o segundo termo representa a influência de novas partículas adicionadas desde t_0 . Q é a função probabilidade de transição que, grosseiramente falando, informa a probabilidade de que uma partícula na posição \vec{r}' no instante t' desloque-se para a posição \vec{r} no instante t ($t > t'$).

A formulação Euleriana é muito utilizada porque propriedades Eulerianas (velocidade, temperatura ou concentração, por exemplo) são prontamente mensuráveis por aparelhos instalados em pontos fixos do escoamento, e também porque as expressões matemáticas são diretamente aplicáveis a situações com reações químicas presentes. Infelizmente a abordagem Euleriana leva a um sério obstáculo matemático, no caso de escoamentos turbulentos, conhecido como o problema do fechamento ("closure problem") para o qual nenhuma solução genérica válida foi ainda encontrada (Seinfeld, 1986, Cap. 12).

Do outro lado, a técnica Lagrangeana tenta descrever a concentração em termos das propriedades estatísticas dos deslocamentos de grupos de partículas no escoamento turbulento. O tratamento matemático é mais fácil (não há o problema do fechamento), mas a aplicabilidade das equações resultantes é limitada devido à dificuldade de encontrar expressões que descrevam com alguma precisão as propriedades estatísticas das partículas. Também as equações não são diretamente aplicáveis a problemas envolvendo reações químicas não lineares.

Aqui é conveniente dizer que as equações resultantes dos modelos de pluma gaussiana podem ser obtidos tanto pela abordagem Euleriana como Lagrangeana, levando a resultados idênticos. Seinfeld (1986, caps. 13 e 14), apresenta a obtenção das equações de concentração do modelo gaussiano pelos dois métodos.

O primeiro trabalho numérico que constatamos na literatura para calcular concentrações de contaminantes na atmosfera foi o de Brock e Hewson (1963), que utilizava um computador analógico para calcular a dispersão turbulenta desde fontes elevadas, entre a camada de inversão e o solo, com difusividades turbulentas constantes ou função da distância percorrida pela pluma. Shir (1970), simulou numericamente a influência de parâmetros meteorológicos sobre a distribuição de poluentes emitidos por uma fonte em linha e concluiu que a velocidade do vento, a estabilidade atmosférica e a intensidade da fonte, quanto ao calor emitido, eram significativos na distribuição. Lantz (1972) simulou numericamente o escoamento em região de topografia variável, com ventos transientes e concentração de poluentes de múltiplas fontes com a finalidade de determinar a localização, projeto e operação de plantas industriais. Runca (1975) apresentou um método misto Euleriano-Lagrangiano para tratar taxas de emissão, velocidade do vento e coeficiente de difusão variáveis para fontes lineares. A abordagem Lagrangeana foi utilizada para o transporte advectivo na direção horizontal e a Euleriana para o difusivo na direção vertical, este último sendo computado com um esquema de diferenças finitas implícito e que permitia malha não igualmente espaçada.

Lamb (1978) desenvolveu um modelo numérico que utilizava a equação de difusão Lagrangeana para simular a dispersão de partículas não flutuantes (sem efeitos de empuxo) emitidas de fontes pontuais elevadas utilizando dados quantitativos fornecidos pelo modelo numérico de J. W. Deardoff sobre a turbulência na camada limite convectiva da atmosfera.

Lee (1978) utilizou a técnica de elementos finitos para a previsão do escoamento turbulento e dispersão em terrenos não planos. Carmichael (1980) utilizou a técnica numérica LOD (Locally One Dimensional) para aproximar a solução da equação da concentração. A técnica consiste basicamente em dividir o problema bi ou tridimensional em uma série de problemas unidimensionais, com a finalidade de diminuir o esforço e capacidade computacional necessários para a solução numérica. Métodos baseados na separação dos operadores ("operator splitting methods"), introduzidos por Yanenko e Marchuk (1966), têm sido bastante empregados

na solução de problemas de dispersão convectiva-difusiva. Baseiam-se na separação de cada intervalo de tempo em três passos: um passo que só considera os termos advectivos, outro só os termos difusivos e um terceiro só os termos fontes (processos de remoção úmida ou reações químicas). Além de diminuir a capacidade computacional necessária (em comparação com uma solução conjunta, com todos os termos da equação governante), este método permite que esquemas numéricos apropriados para cada tipo de operador sejam empregados separadamente. No entanto, uma desvantagem séria surge pois erros adicionais são introduzidos devido à separação dos operadores (Hauguel, 1985). É nossa opinião de que a separação de operadores desacopla os fenômenos envolvidos (convecção, difusão e reações), uma vez que trata cada um deles como atuando em separado, em seqüência. Portanto a solução da equação completa, com todos os termos tratados em conjunto em cada intervalo de tempo da solução, embora exija melhores técnicas numéricas e muito mais capacidade computacional, deve fornecer resultados melhores.

Pudemos constatar na revisão da literatura que nos últimos 15 anos a dispersão de poluentes na atmosfera tem sido estudada em nível de modelagem matemática envolvendo simulação numérica, segundo algumas linhas principais de pesquisa, quais sejam as que tratam casos específicos como poluição urbana, poluição costeira (brisa mar-terra-mar), dispersão em montanhas e vales, poluição ao longo de rodovias e descargas radiativas acidentais; e as que tratam problemas genéricos da dispersão em micro e mesoescala na camada limite atmosférica. A seguir fazemos um apanhado de alguns dos trabalhos que encontramos.

Sobre poluição urbana temos, mais recentemente, os trabalhos de McRae et al (1982), Gryning e Lyck (1984), Mersden et al (1987), Hanna e Chang (1989) e Scheffe e Morris (1993).

Com relação à dispersão na atmosfera costeira temos os trabalhos de Kitada (1987), Ozoe et al (1983), Kitada et al (1984), Kostryukov e Novitskii (1986) e Kitada e Kitagawa (1990). Nesses problemas é importante prever a dinâmica da estrutura da frente de brisa marítima e terrestre, e da camada limite térmica interna para a previsão da dispersão a partir de fontes próximas à costa. São problemas intrinsecamente transientes, com periodicidade típica de 24 horas.

Beeljars (1987), McNider e Pielke (1984), Snyder et al (1991) e Yamada (1992), simularam numericamente o escoamento e a dispersão de poluentes sobre grandes montanhas e vales, abordando os fenômenos típicos que ocorrem nessas configurações de terreno.

A poluição ao longo de grandes rodovias foi estudada por Hickmann e Colwill (1982), Waterfield e Hickmann (1982) e Jakeman et al (1984).

O trabalho de Apsimon (1987) é um exemplo de estudo de descargas acidentais onde foi modelada a dispersão na atmosfera da descarga radiativa de Chernobyl através da Europa.

Essas linhas de pesquisa (citadas nos últimos cinco parágrafos) concentram-se no desenvolvimento de modelos especializados para tratar casos característicos de dispersão, onde os fenômenos físicos envolvidos são estudados com profundidade e os modelos são verificados através, principalmente, de medições de campo para situações reais existentes ou experimentos de campo, através da emissão de gases traçadores inertes (SF_6 por exemplo) e instalação de postos de monitoramento das variáveis meteorológicas e das concentrações. A concordância dos resultados na grande maioria dos casos é muito boa no aspecto qualitativo. Já quantitativamente os resultados e conclusões dos autores deixam clara a dificuldade de se obter divergências (com relação a valores experimentais) inferiores a 50%, em média. Muitas vezes, os resultados são muito bons (diferenças inferiores a 20%) em alguns locais (da região estudada) e razoáveis ou mesmo ruins (diferenças superiores a 100%) em outros.

Uma outra grande linha de pesquisa que se utiliza da modelagem matemática e simulação numérica da dispersão na atmosfera é a que trata dos problemas de poluição na mesoescala atmosférica (também chamada de escala regional) que é da ordem de centenas de quilômetros na direção horizontal e alguns quilômetros na vertical. Casos típicos nesta escala envolvem o estudo do transporte, deposição e reações químicas de inúmeros poluentes emitidos de diversas fontes existentes numa região (da ordem de 10 mil a 1 milhão de km^2). Nesta escala são importantes os fenômenos químicos das fases gás, líquida e sólida, a conversão de poluentes primários em secundários, lavagem por precipitação e a interação com aerossóis. A topografia do terreno, no entanto, nesta escala não é de importância fundamental, como ocorre nos problemas de microescala. Na mesoescala os modelos de dispersão atmosférica devem incorporar aspectos de previsão meteorológica, já que as escalas de tempo envolvidas são da ordem de dias.

Os modelos para dispersão em mesoescala estão bastante difundidos na literatura e podem ser divididos em três categorias (Andrén, 1990): modelos tipo "puff", modelos de partícula Lagrangeana e modelos Eulerianos turbulentos com fechamento de primeira ordem (conceito de difusividade turbulenta) ou de segunda ordem (modelo para as tensões de Reynolds). Cabe aqui ressaltar que os termos primeira e segunda ordem não se referem à precisão dos modelos, sendo simplesmente a designação usual que encontramos nos trabalhos da área.

Os modelos do tipo "puff" descrevem a dispersão da pluma por uma formulação semiempírica para a dependência do tamanho da pluma com a estabilidade atmosférica e o cisalhamento do vento. Entre os trabalhos que utilizam esse tipo de modelo estão o de Mikkelsen et al (1984), o de Fisher e Smith (1987), e Verver e De Leeuw (1992). Tais modelos são limitados no sentido de que não se adequam a casos com não homogeneidade horizontal ou vertical do escoamento turbulento. Para os modelos de partícula Lagrangeana e modelos de turbulência de primeira e segunda ordem, o necessário fornecimento de dados meteorológicos é geralmente obtido de uma simulação fluidodinâmica cobrindo a área de interesse com uma malha tridimensional. No modelo de partícula Lagrangeana a dispersão do poluente é prevista por uma descrição estatística do comportamento de elementos de fluido isolados, o que envolve algum empirismo na descrição das estatísticas Lagrangeanas. São exemplos desse tipo os modelos de Lange (1978) e Garret e Smith (1984). Os modelos turbulentos com fechamento de primeira ordem utilizam o conceito de difusividade turbulenta, introduzido por Boussinesq (1877). São exemplos de trabalhos que exploram esses tipos de modelos os de Van Dop et al (1982), que descreve o modelo KNMI, e o de Blondin (1984), onde são discutidos os principais aspectos atmosféricos que contribuem para o transporte de poluentes na mesoescala. Recentemente, Boybeyi (1993) desenvolveu um modelo para investigar circulações na mesoescala e a dispersão de poluentes associada, incluindo efeitos de topografia, grandes corpos d'água e áreas urbanas, utilizando o modelo $k-\epsilon$ de turbulência.

Há também modelos de dispersão que utilizam fechamento de segunda ordem (modelo das tensões de Reynolds), como o de Andrén (1990), que se utiliza de dados meteorológicos obtidos de um modelo hidrodinâmico (com fechamento de segunda ordem), também desenvolvido por Andrén (1989); e o de Pai (1991). Nesses modelos o número de equações diferenciais a resolver é bem maior que nos fechamentos de primeira ordem (conceito de difusividade turbulenta) e o esforço e capacidade computacional requeridos são, atualmente, demasiado elevados. Em

modelos de primeira ordem temos uma equação de transporte para cada espécie química enquanto que nos de segunda ordem temos até 5 equações para cada espécie, como no trabalho de Andrén (1990).

Pudemos constatar que os modelos que dispõem de um sofisticado tratamento para a turbulência não incorporam um módulo químico (ou então consideram apenas reações químicas de primeira ordem, como no trabalho de Yeh, 1987), e portanto prestam-se à previsão de dispersão a distâncias de poucos quilômetros, para poluentes considerados inertes. Já os modelos que destinam-se a prever deposição ácida de poluentes abrangem distâncias maiores, da ordem de centenas de quilômetros e escalas de tempo de dias. Estes modelos possuem um sofisticado módulo químico e recebem os parâmetros meteorológicos de vento e difusividades turbulentas fornecidos por modelos hidrodinâmicos, dados obtidos de estações meteorológicas ou a combinação destes. O modelo STEM-II (Carmichael et al, 1986, Shin e Carmichael, 1992) resolve equações diferenciais de transporte para 19 espécies advectadas, considerando fase líquida e gasosa, e equações algébricas para 22 espécies consideradas em pseudo regime permanente, num domínio de 8 km de altura. Espécies admitidas como em pseudo regime permanente são aquelas envolvidas em reações químicas rápidas, cujas constantes de reação são altas, com um escala de tempo das reações muito menor que as escalas de tempo de convecção e difusão. O método numérico usado é uma combinação de separação dos operadores e elementos finitos, chamado LOD-FEM (Locally One-Dimensional, Finite Element Method). Shin (1990), em sua tese, aplicou este método desenvolvido por Carmichael no estudo de 2 episódios regionais no leste dos EUA, visando avaliar o modelo e melhorar a sua implementação computacional através de paralelização e vetorização. Um resumo desse trabalho foi publicado em artigo por Shin e Carmichael (1992).

Um outro modelo com tratamento químico sofisticado é o ADOM (Acid Deposition Model), de Venkatram et al (1988), que trata 100 reações químicas entre 50 espécies, sendo 30 delas advectadas. O domínio na direção horizontal é de aproximadamente 1000 km e estende-se a 10 km na vertical. Temos também nessa mesma linha os trabalhos de Lamb (1985) e Chang et al (1988).

Modelos numéricos para o cálculo da dispersão atmosférica em pequena escala (da ordem de alguns km) foram desenvolvidos para suprir as deficiências dos modelos analíticos que não se

aplicam a terrenos com topografia complexa. Como a nível de pequena escala atmosférica a forma do terreno desempenha papel importante nos campos de velocidade, temperatura e propriedades turbulentas, a previsão hidrodinâmica do escoamento deve ser sofisticada o suficiente para que os resultados por ela fornecidos, uma vez alimentando um modelo de dispersão, permitam que este produza resultados satisfatoriamente bons para os campos de concentração dos poluentes a serem estudados.

Inicialmente os modelos para dispersão na pequena escala utilizavam-se de perfis de velocidade e coeficientes de difusão na camada limite atmosférica fornecidos por expressões empíricas baseadas na teoria da similaridade de Monin-Obukhov. Embora produzissem melhores resultados que os modelos analíticos, pois esses só permitiam considerar aproximações do tipo leis de potência (na forma das equações 1.6 e 1.7) para as expressões dos perfis de velocidade e difusividade turbulenta, ainda só se aplicavam para terrenos quase planos, já que a dinâmica do escoamento turbulento não era resolvida. Modelos mais elaborados permitiam que o campo de velocidades e as condições de estabilidade atmosférica (que determinavam as difusividades turbulentas) fossem fornecidos por estações meteorológicas locais, como o modelo de Runca et al (1979), aplicado à região de Veneza, Itália, que empregava discretização cartesiana, malha tridimensional não igualmente espaçada e o método dos passos fracionados (separação dos operadores) para a solução numérica da equação da concentração. A altura inicial da pluma era prevista por equações empíricas em função da velocidade e temperatura de descarga.

O uso de um sistema de coordenadas que acompanhasse a topografia do terreno foi adotado nos modelos ATMOS1 e ATMOS2 (Davis et al, 1984). O código ATMOS1 calcula o campo de velocidade a partir de dados de campo disponíveis, usando um princípio de minimização de erros de conservação da massa apresentado por Sherman (1978). Com o campo de velocidade do vento fornecido por ATMOS1, o código ATMOS2 calcula o transporte de um poluente por convecção e difusão turbulenta, cujos coeficientes de difusividade foram estimados por expressões empíricas, dependentes das classes de estabilidade de Pasquill. O modelo MODIS (MOmentum DIStribution, Eppel et al, 1983), originalmente para condições neutras, estáveis e fracamente instáveis, também utilizava perfis de velocidade e temperatura medidos em campo, porém os coeficientes de difusividade horizontal e vertical eram obtidos da solução de duas equações diferenciais acopladas. Eppel et al (1991) estendeu a aplicação do MODIS para condições altamente instáveis.

Em muitas situações, a maior parte dos casos certamente, não se dispõe de dados meteorológicos de campo (ou apenas tem-se poucos dados) para alimentar um modelo de dispersão. Faz-se então necessário utilizar um modelo que descreva o escoamento na camada limite atmosférica na região de interesse e combina-lo a um modelo de dispersão. A previsão do campo de velocidades constitui um problema de mecânica dos fluidos, envolvendo a solução de um sistema acoplado de equações diferenciais parciais, quais sejam, para o caso geral, a equação de Navier-Stokes, a equação da conservação da massa e a equação da energia. Como o escoamento na camada limite atmosférica é turbulento, ainda faz-se necessário um modelo de fechamento da equação de Reynolds para a velocidade média¹. Modelos de dispersão atmosférica dessa natureza foram desenvolvidos desde a década passada, como por exemplo o FITNAH (Gross, 1986) e o ADREA-I (Bartzis, 1985), que foi aprimorado para condições não isotrópicas de turbulência por Bartzis (1989). No ADREA-I o modelo de turbulência é de uma equação (para a energia cinética turbulenta) e a solução numérica do conjunto de equações é feita por diferenças finitas, adotando diferenças centrais como função de interpolação para os termos difusivos e o esquema "upwind" para os convectivos.

Um estudo e modelagem de zonas de recirculação turbulenta presentes atrás de montanhas e edificações foi feito por Dawson (1987), constatando que até aquela data mínimo esforço havia sido dispensado à simulação de tais recirculações em topografias complexas. Dawson utilizou um modelo de turbulência anisotrópico, de primeira ordem a duas equações e um esquema numérico de diferenças finitas em malha cartesiana para simular experimentos com gases traçadores sobre um prédio ou uma montanha isolados. Nesse trabalho, constatou-se que os resultados numéricos mostraram boa concordância com medições em túnel de vento, exceto muito próximo do solo. Também o transporte e dispersão de uma pluma sobre uma colina de aproximadamente 300m de altura (Steptoe Butte - WA - EUA) foi simulada e comparações com medições de campo da concentração ao nível do solo foram feitas.

Sykes e Henn (1992) aplicaram um modelo do tipo LES (Large Eddy Simulation) para simulação de plumas inertes, cujos resultados reproduziram a maioria dos aspectos dos experimentos de laboratório feitos por Fackrell e Robins (1982) em túnel de vento. Sykes et al

¹ A questão da turbulência atmosférica será discutida na seção 2.4.

(1992) aplicou o método LES para uma pluma reativa, considerando a reação de monóxido de nitrogênio com ozônio atmosférico, formando dióxido de nitrogênio. O objetivo do trabalho foi o de avaliar o efeito das flutuações turbulentas sobre reações químicas não lineares.

Os trabalhos que utilizam um modelo de turbulência de primeira ordem (conceito de difusividade turbulenta) a duas equações são muito utilizados pela sua relativa simplicidade (quando comparados com modelos de tensões de Reynolds ou LES - *Large Eddy Simulation*) e por produzirem resultados promissores. Modificações em cima do bem conhecido modelo k- ϵ foram encontradas na literatura para modelar escoamentos atmosféricos. Koo (1993) propôs um k- ϵ modificado não isotrópico para levar em conta as diferentes difusividades turbulentas, nas direções horizontal e vertical que ocorrem na atmosfera. Seu modelo é derivado do modelo algébrico de tensões (*algebraic stress model*) e foi aplicado em problemas unidimensionais para calcular perfis verticais de velocidade, temperatura potencial e variáveis turbulentas para escoamento horizontal numa camada limite atmosférica homogênea (sem gradientes na direção lateral, transversal ao escoamento). O modelo também foi aplicado em problemas bidimensionais para simular a circulação da brisa marítima e a manipulação da camada limite atmosférica noturna (condição estável, pouca turbulência e pouca dispersão) por uma “cerca térmica” (*thermal fence*) que consiste, basicamente, no aquecimento de uma porção do solo, criando uma região neutra ou instavelmente estratificada a jusante da fonte para aumentar a dispersão de poluentes. Esse modelo de Koo é similar ao modelo nível 2.5 de Mellor e Yamada (1982).

Recentemente, Castro e Apsley (1997) propuseram uma modificação no clássico k- ϵ (*dissipation modification*, como designado pelos autores) para simular atmosfera neutra e estável. Foram simulados numericamente experimentos realizados em atmosfera neutra em túnel de vento com montanhas bidimensionais de várias razões de aspecto. Para montanhas com inclinação grande o suficiente para produzir uma recirculação permanente atrás das mesmas, esta foi capturada e seu impacto sobre a concentração foi satisfatoriamente previsto. No entanto, para inclinações menores, com recirculação intermitente, os resultados foram menos satisfatórios.

Também Apsley e Castro (1997) aplicaram seu k- ϵ modificado para simular o escoamento e a dispersão em torno de Cinder Cone Butte, uma colina de aproximadamente 100m de altura em Idaho (EUA), na qual a Agência de Proteção Ambiental americana (*Environmental Protection Agency* - EPA) realizou em 1986 uma série de experimentos de dispersão. Um dos experimentos foi simulado numericamente, sob condições de atmosfera estável (Pasquill classe E). O campo de

velocidades calculado foi consistente com o observado, no qual o escoamento altamente estratificado próximo do solo é forçado a contornar a montanha, movendo-se em planos horizontais em torno de sua base. Os resultados também mostraram a tendência do modelo de superestimar as concentrações. Isto foi explicado pelo fato do modelo de turbulência ser isotrópico, que prevê satisfatoriamente a difusividade turbulenta na direção vertical, subestimando assim a difusividade na direção horizontal, especialmente no caso de atmosfera estável.

No Brasil, pouquíssimos trabalhos têm sido feitos na área de dispersão de poluentes no ar. A pesquisa na área de poluição atmosférica no país tem abraçado outros aspectos do problema, tais como a determinação (medição da concentração) de poluentes atmosféricos (Miyamaru, 1990; Bezerra, 1991), efeitos ambientais e tratamento de efluentes (Branco, 1991; Fernicola e Azevedo, 1980; Sabbag, 1978) e políticas para o meio ambiente (Carvalho, 1987). Sobre dispersão de contaminantes na atmosfera constatamos os trabalhos de Abreu (1984), Kerr (1983) - que estudou os aerossóis da região de Cubatão e dispersão por modelo de pluma gaussiana - e Degrazia (1983). Os únicos trabalhos nacionais que encontramos sobre simulação numérica da dispersão atmosférica, onde foram resolvidas as equações diferenciais de transporte, são os de Dihlmann (1992) - que estudou a descarga térmica de chaminés em ambiente uniforme e estratificado - Santos et al (1992, 1993) e Santos (1992). Nos trabalhos de Santos foi utilizado um modelo Euleriano tridimensional para o transporte e dispersão de espécies inertes (gases ou aerossóis) em atmosfera neutra a partir de uma fonte pontual sobre terreno plano, utilizando o modelo k- ϵ de turbulência e malha cartesiana. Foi assumida a hipótese simplificativa de que a difusão na direção do vento é desprezível em relação ao transporte convectivo, o que reduz muito o esforço computacional, pois as equações de transporte tornam-se parabólicas nessa direção, permitindo que o problema seja resolvido em marcha. Entendemos que essa simplificação prejudica a qualidade dos resultados, especialmente para casos de baixa velocidade do vento. Também, no caso de topografia complexa com possíveis recirculações do escoamento, a aproximação parabólica não pode ser utilizada. A aplicabilidade desse modelo para estudo de casos reais é limitada pois o mesmo não permite topografias irregulares, não considera o perfil de velocidade na CLA (a velocidade do vento na entrada do domínio é constante com a altura) e também não considera a variação vertical da temperatura potencial, o que não permite tratar de atmosferas estável ou instavelmente estratificadas.

1.4 - Objetivos da Tese

Conforme pudemos constatar na revisão da literatura, os modelos numéricos mais avançados de dispersão de poluentes na atmosfera ou dedicam detalhada atenção aos processos químicos e à previsão meteorológica envolvidos no transporte na mesoescala atmosférica (≈ 1000 km), ou concentram esforços na determinação dos parâmetros de difusão turbulenta e efeitos topográficos da pequena escala (≈ 10 km), quando então os fenômenos meteorológicos são tratados simplificadamente. Percebemos então uma lacuna no estudo da dispersão na atmosfera: um modelo matemático relativamente complexo para poder descrever na pequena escala atmosférica o escoamento turbulento na camada limite, que leve em consideração os fenômenos físicos relevantes que ocorrem na baixa atmosfera e a interação da pluma com o vento, aliado a um modelo de dispersão que permita prever os campos de concentração de poluentes primários e dos principais poluentes secundários emitidos por fontes industriais.

No sentido de contribuir para o preenchimento dessa lacuna desenvolvemos um modelo matemático que permite, mediante simulação numérica, fazer a previsão dos campos de concentração de poluentes gasosos ou particulados emitidos por uma ou mais fontes pontuais em terreno de topografia variável. Dentro da filosofia de que tal modelo deve levar em consideração os fenômenos físicos relevantes ao problema da dispersão em pequena escala, incorporamos ao mesmo, por exemplo via parametrizações em termos fontes das equações ou nas condições de contorno, a influência desses fenômenos. O modelo então permite considerar:

- A forma real do terreno (topografia irregular ou terreno complexo);
- A estabilidade atmosférica (estratificação térmica neutra, estável ou instável);
- A intensidade e direção do vento;
- A altura da camada de mistura (altura da CLA ou altura da camada de inversão térmica);
- A rugosidade do terreno;
- Troca de calor com o solo;

Também outros fenômenos podem ser incorporados no modelo, sendo que não foram simulados problemas envolvendo tais situações pela dificuldade de obtenção de resultados

experimentais para comparação, e também devido à limitação no tempo para concluir esse trabalho. Tais fenômenos são:

- A presença de particulados com velocidade de deposição por gravidade;
- Processos físicos de remoção, como a deposição seca e a úmida (lavagem por chuvas);
- A interação da pluma com o ambiente onde é descarregada, no caso da descarga ser feita através de um jato (efeitos de empuxo e troca de quantidade de movimento que afetam o escoamento do ar na região próxima da fonte, que é o caso das chaminés industriais);
- Remoção química dos poluentes primários e formação de poluentes secundários (através de reações químicas).

Não temos a pretensão de prover o modelo de um módulo químico sofisticado, mas apenas permitir, quando necessário, a incorporação das reações mais importantes que determinam a formação de poluentes secundários principais.

A escala de tempo do fenômeno da dispersão de plumas na microescala atmosférica é da ordem de uma hora. Nessa escala de tempo os parâmetros atmosféricos relevantes, como a condição de estabilidade, estratificação e altura da camada limite podem ser considerados constantes. Desta forma, o problema é considerado em regime permanente, desde que as condições de descarga também o sejam. Assim, o comportamento transiente do fenômeno ao longo de um período de tempo (um dia por exemplo) pode ser obtido de uma sequência de estados pseudo-permanentes. Poderíamos também resolver o problema transiente, mas isto demandaria um esforço computacional muito maior que certamente não seria compensado por uma melhora na qualidade dos resultados. Nos casos de descargas descontínuas ou instantâneas (acidentais) a consideração de regime pseudo-permanente descrita acima não pode ser feita, e o problema deve então ser tratado em regime transiente.

Além dos objetivos descritos acima, há também outros não menos importantes, mas que não se referem à modelagem matemática. Desta forma, também é objetivo deste trabalho o desenvolvimento de um código computacional para a solução numérica do sistema de equações diferenciais que constitui o modelo. Na verdade são dois códigos: um para a solução do escoamento e outro para a concentração. Estes programas computacionais passam a constituir uma ferramenta para a solução de problemas aplicados de engenharia, no que diz respeito à dispersão de poluentes na atmosfera.

Uma vez proposto o modelo matemático e construído o programa para a simulação numérica, é imperativo que façamos a verificação e validação dos mesmos. Para tal, os resultados numéricos por nós obtidos são comparados com resultados experimentais e numéricos disponíveis na literatura. Para que a validação do modelo matemático seja confiável, é necessário que os resultados da solução numérica sejam devidamente garantidos. Nesse aspecto, utilizamos funções de interpolação de segunda ordem (QUICK) e conduzimos estudos de refino de malha, com resultados quantitativos, através do método proposto por Roache (1994).

É bastante comum em trabalhos que apresentam soluções numéricas de complexos sistemas de equações diferenciais (como é o caso em Dinâmica dos Fluidos Computacional) encontrarmos análises somente qualitativas demonstrando a qualidade da solução (através, por exemplo, da proximidade de curvas num gráfico mostrando a influência do refino de malha). Muitos trabalhos nem mesmo mostram tais curvas ou então limitam-se a citar o tamanho das malhas utilizadas. É nossa experiência que problemas complexos, envolvendo equações diferenciais não lineares em domínios tridimensionais, podem ter soluções numéricas muito diferentes, de acordo com uma série de fatores acerca do método numérico de solução, critérios de convergência, funções de interpolação, tamanho e forma da malha utilizada, forma de aplicação das condições de contorno, entre outros. Assim entendemos que deva ser uma preocupação constante do analista numérico assegurar da melhor forma possível (dentro das limitações computacionais a que se está sujeito) a qualidade da solução. Isto não significa que se deva trabalhar com a pretensão de afirmar que a solução numérica está correta, mas sim poder informar quantitativamente quanta incerteza há nos resultados. Cabe também citar que uma vez que não se tenha uma solução analítica para comparar, quaisquer afirmações com relação aos erros embutidos numa solução numérica devem ser entendidas apenas como estimativas. Quanto mais simples o problema matemático (menor número de equações, não linearidades mais fracas, menor número de dimensões envolvidas) tanto mais fácil é a tarefa de estimar os erros da solução numérica, bem como mais confiáveis são essas estimativas. Ainda sobre erros da solução, no caso de escoamentos turbulentos, resultados diferentes são obtidos de acordo com os modelos de turbulência utilizados.

Creemos que atualmente, dentro da Dinâmica de Fluidos Computacional, os problemas de escoamentos tridimensionais turbulentos em geometrias complexas (como é o caso da dispersão na atmosfera) estão entre os mais desafiadores e difíceis de serem modelados e resolvidos.

1.5 - Organização da tese

Neste capítulo introdutório dispensamos atenção especialmente à revisão da literatura, a partir da qual delineamos os objetivos a serem alcançados com esse trabalho, do ponto de vista de contribuição científica. No capítulo dois descrevemos alguns aspectos físicos do problema da dispersão de poluentes na atmosfera e apresentamos o modelo matemático que utilizamos.

No capítulo três são discutidos mais detalhes a respeito dos fenômenos atmosféricos que interferem no processo de dispersão e como os mesmos são levados em consideração pelo modelo matemático.

O capítulo quatro está reservado para descrever a metodologia numérica empregada na solução do modelo matemático. Os leitores não acostumados com métodos numéricos de solução de sistemas de equações diferenciais, mas interessados na modelagem do fenômeno da dispersão de poluentes, poderão ter uma idéia a respeito dessa árdua tarefa. Aqueles já familiarizados com o método de volumes finitos ali encontrarão detalhes específicos de nossa metodologia.

No capítulo cinco apresentamos alguns casos testes utilizados para validar o código computacional. São comparados nossos resultados com outros resultados numéricos e experimentais para alguns escoamentos laminares e turbulentos.

Os capítulos seis e sete são dedicados à apresentação dos resultados obtidos da aplicação do modelo a problemas de dispersão em escala reduzida (experimento de laboratório) e em escala real. Nossos resultados numéricos são comparados com resultados obtidos em túnel de vento (capítulo seis) num estudo feito pela Mitsubishi Heavy Industries (Japão), e também com resultados experimentais e numéricos (capítulo sete) sobre o estudo de campo feito pela EPA (*Environmental Protection Agency*) em Cinder Cone Butte (Idaho - EUA).

O capítulo oito apresenta as conclusões do trabalho e sugestões para pesquisas futuras.

CAPÍTULO DOIS

FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

2.1 - Considerações iniciais

No final do capítulo anterior foram colocados os objetivos traçados para o trabalho, o que envolve a consideração de uma série de fenômenos que influenciam a dispersão na atmosfera. Neste capítulo mostraremos através da formulação do problema como pretendemos modelar matematicamente esses fenômenos, que não são todos os processos físicos e químicos presentes no problema da dispersão de uma pluma, mas que entendemos ser os mais relevantes e factivamente possíveis de serem considerados num modelo numérico que pretende ser aplicável a problemas reais de engenharia ambiental.

Na figura 2.1 representamos esquematicamente o problema da dispersão de poluentes no ar, tal como ela será abordada pelo modelo, ou seja, dentro de um domínio de interesse apropriado.

A fronteira inferior é delimitada pela topografia do terreno e a superior pela altura da camada limite atmosférica, que será discutida adiante. As fronteiras laterais limitam a região do terreno de interesse para o problema, devendo entretanto estarem posicionadas de tal maneira que se possa aplicar aí condições de contorno razoavelmente conhecidas, como será visto quando discutirmos o problema da aplicação dessas.

Primeiramente vamos separar a tarefa de prever a dispersão de poluentes no ar, do ponto de vista matemático, em duas etapas desacopladas entre si.

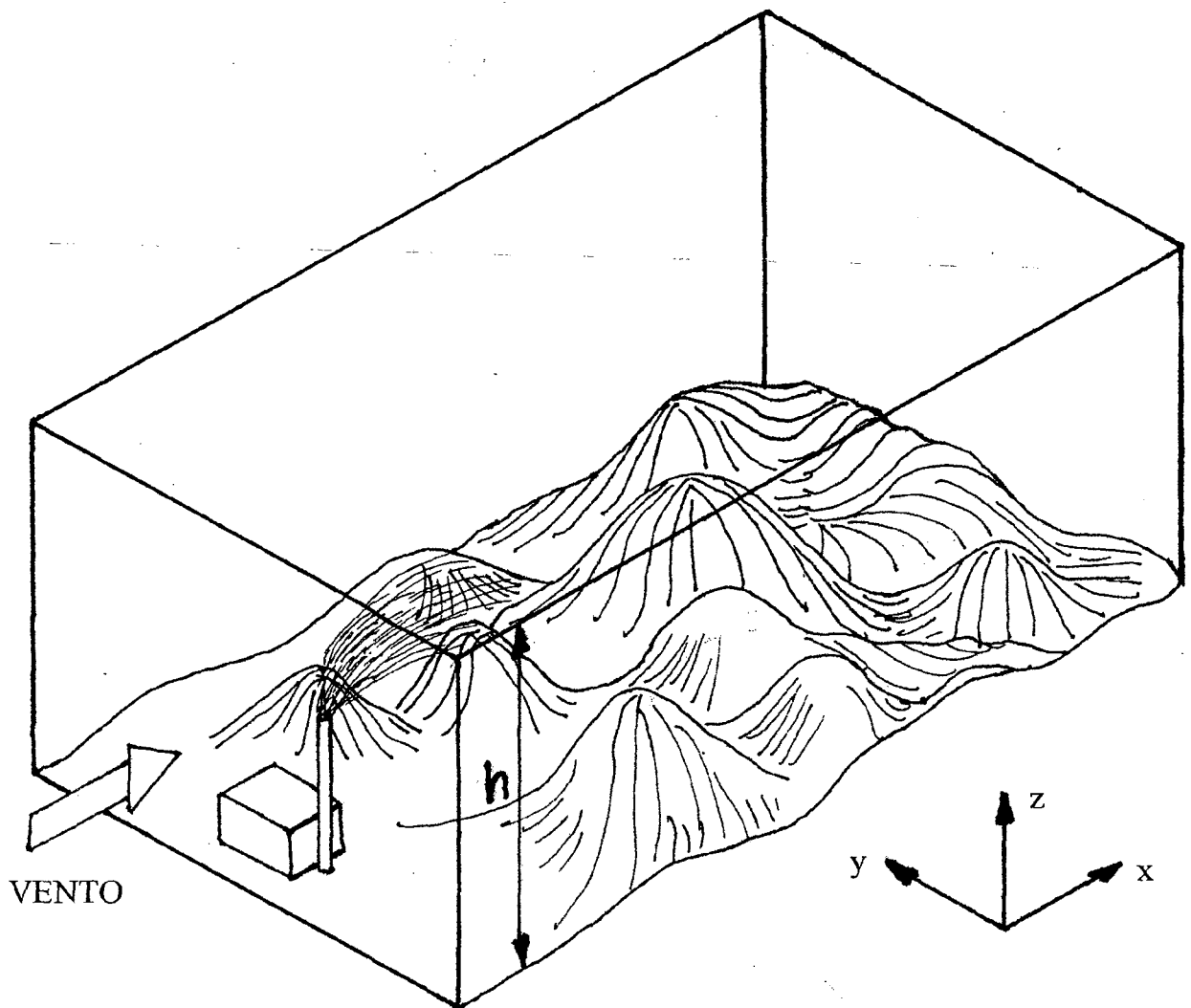


Figura 2.1 - Domínio do problema da dispersão na microescala atmosférica

1ª etapa: solução do escoamento turbulento na região de interesse. Isto envolve a descarga do jato lançado pela chaminé - afetando a região próxima das fontes - e o domínio afastado em torno das fontes, estendendo-se até uma distância onde as concentrações diminuem a valores muito baixos ou a partir da qual não se tem interesse em calculá-las. Esta etapa envolve a solução das equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia, que constituem um sistema acoplado. Esta última não será necessária se a atmosfera estiver em condições de estabilidade neutra e os efluentes forem descarregados à temperatura ambiente, ou próxima a esta, de tal forma que os efeitos de empuxo possam ser desconsiderados. Os resultados dessa etapa, que são os campos de velocidade, pressão, temperatura e propriedades turbulentas, alimentarão a segunda etapa do processo.

2ª etapa: determinação dos campos de concentração dos poluentes a partir da solução das equações de conservação das espécies químicas consideradas. Esta etapa pode ser resolvida separadamente, usando os campos de velocidade e difusividade turbulenta resultantes da primeira etapa, mediante duas hipóteses perfeitamente admissíveis.

- A concentração dos poluentes não interfere no campo de velocidades: as fontes emissoras são tratadas como sendo de descarga de ar com concentrações prescritas dos poluentes. As emissões industriais são na maioria uma mistura homogênea de ar e contaminantes. Se na descarga a concentração de poluentes, com massa específica muito diferente daquela do ar, for tão alta a ponto de que a mistura não possa mais ser considerada como ar (devido aos efeitos de empuxo) então isto só afetará os resultados na região próxima do ponto de emissão, onde as concentrações ainda são altas. Regiões mais afastadas não são afetadas. Na realidade, as emissões industriais de mais alta concentração chegam a 10.000 ppm, o que significa uma mistura de aproximadamente 1% de material contaminante e 99% de ar. Logo, esta hipótese é perfeitamente aceitável para os casos de interesse prático.

- A concentração dos poluentes não interfere no campo de temperatura: as reações químicas presentes não liberam nem absorvem calor, embora suas velocidades de reação possam variar com a temperatura.

2.2 - A Estabilidade Atmosférica

Com relação ao problema da dispersão atmosférica na microescala meteorológica (da ordem de alguns quilômetros), a região da atmosfera que influencia o transporte e a dispersão de poluentes é a chamada camada limite atmosférica, grosseiramente os primeiros 500m acima do solo. Esta porção da atmosfera sofre a influência da superfície terrestre na estrutura dos ventos. Dentro da camada limite atmosférica (denominaremos abreviadamente CLA) os ventos são influenciados pelo escoamento de ar acima e pelos efeitos de fricção, topografia e trocas de calor com a superfície. Os ventos na região acima da CLA, chamados de ventos geostróficos ou sinóticos, são governados pelo balanço entre o gradiente de pressão e a força de Coriolis, devido à rotação da Terra (Seinfeld, 1986).

O perfil vertical de temperatura na CLA tem importante papel na turbulência atmosférica e conseqüentemente na estrutura dos ventos. Na troposfera, que é a camada atmosférica mais próxima do solo estendendo-se até aproximadamente 12 km acima deste, a temperatura normalmente diminui com a altura na razão de $\approx 10^{\circ}\text{C} / \text{km}$ devido à diminuição da pressão (efeito semelhante ao da expansão adiabática de um gás). Quando um perfil de temperatura como este existe na CLA dizemos que a atmosfera está em condições de estabilidade neutra (figura 2.2 , situação 1). Nestas circunstâncias uma parcela de ar a qualquer altura não tende a subir nem a descer. Entretanto, raramente a atmosfera encontra-se nesta condição de equilíbrio pois as trocas de calor com a superfície e fenômenos de larga escala geralmente resultam em perfis de temperatura diferentes desse neutro, que nos servirá de referência. Se a temperatura diminui com a altura numa taxa maior que a adiabática (neutra) então a atmosfera está instável (figura 2.2 , situação 2). Quer dizer que uma parcela de ar deslocada de sua posição original para cima ou para baixo continuará a mover-se no sentido para o qual foi deslocada. No caso contrário, em que a diminuição da temperatura com a altura se der a uma taxa menor que a de condição neutra ou mesmo houver aumento, a atmosfera estará estável (figura 2.2 , situações 3 e 4 respectivamente), e uma parcela de ar que for deslocada de sua posição original terá seu movimento inibido e tenderá a retornar a sua posição inicial. Em condições de instabilidade atmosférica movimentos na direção vertical são estimulados por forças de empuxo e em condições estáveis estes são inibidos.

Baseado nessas conclusões com relação às condições de estabilidade atmosférica, podemos já antecipar que condições estáveis tendem a inibir a turbulência e portanto diminuir seu efeito dispersivo na CLA, o que não é favorável à dispersão de poluentes.

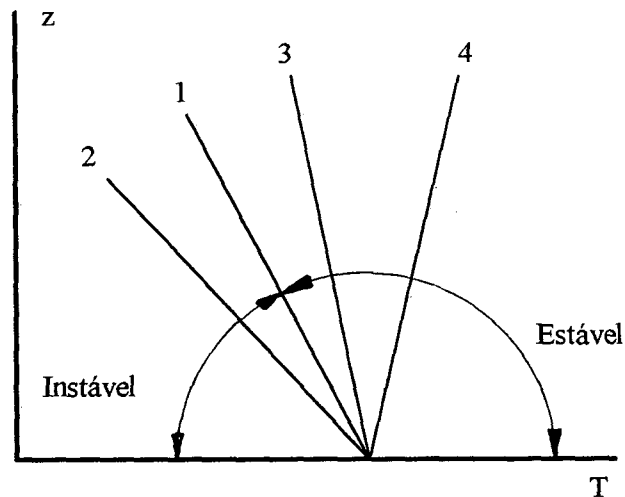


Figura 2.2 - Perfis de temperatura e condições de estabilidade atmosférica

Para condições similares de vento, a instabilidade atmosférica é mais freqüente e de maior intensidade no período diurno do que no noturno, em dias claros do que nos dias encobertos, em noites encobertas do que em noites limpas, e em dias de verão do que em dias de inverno (Stern, 1968).

2.3 - Equações Governantes

Nesta seção são apresentadas as equações governantes do modelo de dispersão, separadas em dois grupos correspondentes às etapas da modelação discutidas na seção 2.1. A obtenção das mesmas é feita a partir das equações da mecânica dos fluidos (continuidade, Navier-Stokes e energia) na sua forma geral.

2.3.1 - Equações da Mecânica dos Fluidos Para a Atmosfera

As equações de conservação da massa, da quantidade de movimento¹ e da energia para um fluido newtoniano com viscosidade constante num referencial em rotação são, respectivamente,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (2.1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\mu}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) - \rho g \delta_{i3} + F_i \quad (2.2)$$

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) = k_a \frac{\partial^2 T}{\partial x_j \partial x_j} + \beta T \frac{Dp}{Dt} + \mu \Phi + S \quad (2.3)$$

São apropriados neste ponto alguns comentários a respeito de certos termos das equações acima, quando estamos tratando de escoamento atmosférico.

O termo de forças de campo (outras que não a gravitacional), F_i , no caso de escoamentos atmosféricos é a força de Coriolis.

$$\vec{F} = -2\rho(\vec{\Omega} \times \vec{u}) \quad (2.4)$$

Nos problemas de microescala meteorológica a força de Coriolis pode ser desprezada, já que o escoamento do ar nesta escala praticamente não é influenciado pela rotação da Terra (Seinfeld, 1986, cap.12). Esta questão é melhor discutida na seção 7.3. O terceiro termo do lado direito da equação do movimento pode ser desprezado em (2.2) por ser muito pequeno comparado aos demais. De fato, como as variações de massa específica nos escoamentos na atmosfera são muito pequenas, pela equação da continuidade (2.1) temos

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} \cong 0 \quad (2.5)$$

Pelas mesmas razões descritas no parágrafo precedente, o termo temporal da equação de conservação da massa será desprezado. No entanto, será mantido o gradiente vertical da massa específica, uma vez que na realidade esta sofre variações (ainda que pequenas) com a altura e principalmente com a temperatura, que são responsáveis pelo movimento de convecção natural causado por forças de empuxo. Na equação do movimento na direção vertical os efeitos de empuxo são considerados no termo ρg . A massa específica é calculada pela equação de estado dos gases perfeitos.

$$p = \rho R T \quad (2.6)$$

O termo de dissipação viscosa da equação da energia, Φ , será igualmente desprezado já que sua contribuição é insignificante na atmosfera (velocidades baixas quando comparadas com a velocidade sônica). Também o termo de geração de energia, Q , será desprezado pois não consideramos efeitos de geração interna de calor (absorção ou emissão de radiação, por exemplo) nem a presença de umidade, a qual poderia ser responsável por troca de calor latente.

Com base nas hipóteses acima, as equações governantes do escoamento tomam a seguinte forma.

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (2.7)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} - \rho g \delta_{i3} \quad (2.8)$$

¹ Está assumida a hipótese de Stokes de que a viscosidade global do fluido é zero.

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) = k_a \frac{\partial^2 T}{\partial x_j \partial x_j} + \beta T \frac{Dp}{Dt} \quad (2.9)$$

Consideremos por hipótese que a atmosfera esteja em repouso ($u_i = 0$). De (2.8) e (2.9) teremos então as condições para esse estado de equilíbrio ou referência (subscrito "e").

$$\frac{\partial p_e}{\partial x} = \frac{\partial p_e}{\partial y} = 0 \quad \frac{\partial p_e}{\partial z} = -\rho_e g \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial^2 T_e}{\partial z^2} = 0 \quad (2.11)$$

A integração de (2.10) e (2.11), utilizando a equação de estado (2.6), nos fornece expressões para pressão, massa específica e temperatura no estado de equilíbrio que são

$$p_e = p_0 \left(1 - \frac{\Gamma z}{T_0} \right)^{\frac{C_p}{R_{ar}} - 1} \quad (2.12)$$

$$\rho_e = \rho_0 \left(1 - \frac{\Gamma z}{T_0} \right)^{\frac{C_p}{R_{ar}} - 1} \quad (2.13)$$

$$T_e = T_0 \left(1 - \frac{\Gamma z}{T_0} \right) = T_0 - \Gamma z \quad (2.14)$$

onde p_0 , ρ_0 e T_0 são valores de referência, para $z = z_0$, e

$$\Gamma = \frac{g}{C_p} \quad (2.15)$$

é a taxa adiabática de decréscimo da temperatura com a altura.

Quando há movimento, então a pressão, a massa específica e a temperatura podem ser escritas como

$$p(x_i, t) = p_e(z) + \tilde{p}(x_i, t) \quad (2.16a)$$

$$\rho(x_i, t) = \rho_e(z) + \tilde{\rho}(x_i, t) \quad (2.16b)$$

$$T(x_i, t) = T_e(z) + \tilde{T}(x_i, t) \quad (2.16c)$$

Subtraindo o estado de equilíbrio (2.10) do segundo membro de (2.8) obtemos para a equação do movimento

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = - \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} - \tilde{\rho} g \delta_{i3} \quad (2.17)$$

Na atmosfera, a perturbação na massa específica ($\tilde{\rho}$) deve-se muito mais a perturbações na temperatura (\tilde{T}) do que a variações na pressão (\tilde{p}), por serem aquelas muito maiores do que estas. A partir da equação de estado (2.6), temos

$$\tilde{\rho} = \frac{p_e(z) + \tilde{p}}{R(T_e(z) + \tilde{T})} - \rho_e(z) \quad (2.18)$$

Esta forma de escrever o termo de empuxo na equação do movimento é equivalente à aproximação de Boussinesq, normalmente feita para escoamentos incompressíveis.

Consideremos agora a equação da energia. Substituindo (2.16a) em (2.9) e subtraindo o estado de equilíbrio (2.11) do segundo membro temos²

$$\rho C_p \left(\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + u_j \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} + w \frac{\partial T_e}{\partial z} \right) = k_a \frac{\partial^2 \tilde{T}}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{Dp}{Dt} \quad (2.19)$$

² Para o ar podemos utilizar a relação $\beta = 1 / T$.

O último termo de (2.19) pode ser escrito como³

$$\frac{Dp}{Dt} = u_j \frac{\partial}{\partial x_j} (p_e + \tilde{p}) = w \frac{\partial p_e}{\partial z} + u_j \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_j} \cong w \frac{\partial p_e}{\partial z} \quad (2.20)$$

pois em escoamentos na atmosfera

$$u_j \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_j} \ll w \frac{\partial p_e}{\partial z} \quad (2.21)$$

De (2.14) temos que

$$\frac{\partial T_e}{\partial z} = -\Gamma = -\frac{g}{C_p} \quad (2.22)$$

Substituindo (2.20) e (2.22) em (2.19) e levando em conta (2.10), teremos para a equação da energia⁴

$$\rho C_p \left(\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + u_j \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right) = k_a \frac{\partial^2 \tilde{T}}{\partial x_j \partial x_j} \quad (2.23)$$

A temperatura potencial θ é definida por

$$\theta = T \left(\frac{p}{p_0} \right)^{-(\gamma-1)/\gamma} \quad (2.24)$$

e fisicamente é a temperatura que uma parcela de ar seco originalmente a uma temperatura T e uma pressão p (a uma altura z) teria quando deslocada adiabaticamente para o nível do solo,

³ Podemos considerar $\partial p / \partial t = 0$ em escoamentos atmosféricos, como já discutido.

⁴ Consideramos neste ponto $\rho_e = \rho$

onde estaria sob a pressão p_0 . O gradiente vertical de θ pode ser expresso em termos do gradiente vertical de T e do gradiente vertical adiabático de temperatura como

$$\frac{1}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{(\gamma - 1)}{\gamma} \frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial z} = \frac{1}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial z} + \Gamma \right) \quad (2.25)$$

Em $z = 0$, $\theta = T$ se p_0 é tomada como a pressão ao nível do solo. Como em magnitude $\theta \cong T$, a equação (2.25) pode ser aproximada por

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} \cong \frac{\partial T}{\partial z} + \Gamma \quad (2.26)$$

Como $-\Gamma$ é o gradiente vertical adiabático de temperatura (para a condição de equilíbrio, atmosfera neutra), $d\theta / dz$ é uma medida do desvio do perfil real de temperatura em relação às condições adiabáticas. Integrando (2.26) temos

$$\theta = T + \Gamma z \quad (2.27)$$

De (2.25) podemos escrever

$$\frac{1}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial x_i} = \frac{1}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial x_i} + \Gamma \delta_{i3} \right) \quad (2.28)$$

onde o termo entre parênteses (para $i = 3$) é exatamente a diferença entre a taxa de variação vertical real e a adiabática. Substituindo (2.16a) e (2.22) em (2.28) e considerando que $\theta \cong T$, podemos escrever

$$\frac{\partial \theta}{\partial x_i} = \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} \quad (2.29)$$

Substituindo (2.29) em (2.23) obtemos finalmente a equação da energia na forma mais apropriada para problemas atmosféricos.

$$\rho C_p \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} + u_j \frac{\partial \theta}{\partial x_j} \right) = k_a \frac{\partial^2 \theta}{\partial x_j \partial x_j} \quad (2.30)$$

2.3.2 - A Equação da Concentração

Vamos considerar a presença de N espécies químicas, escoando numa mistura com ar atmosférico. A concentração de cada uma, em cada instante, satisfaz um balanço de massa sobre um volume elementar. A variação temporal da concentração de cada espécie será o resultado líquido do balanço entre entradas e saídas de massa daquela espécie por advecção (carregadas pelo escoamento), por difusão (resultante de gradientes de concentração), por reações químicas (criação e destruição) e por fontes de emissão da espécie. Expressando matematicamente esse balanço, temos a equação da conservação da massa para a espécie ou também chamada equação da concentração.

$$\rho \left(\frac{\partial c_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial c_i}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_i \frac{\partial c_i}{\partial x_j} \right) + R_i + S_i \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (2.31)$$

O termo de reações químicas depende, no caso geral, das concentrações das outras espécies envolvidas na reação, bem como da concentração da própria espécie, no caso desta ser um reagente, e também da temperatura. Poderíamos então escrever de uma forma geral $R_i = R_i(c_j, T)$. A velocidade de reação geralmente depende da temperatura. Quanto maior for esta, maior também será aquela, uma vez que a energia interna sendo maior propicia mais colisões intermoleculares, o que acelera a reação.

Observando a equação (2.31) notamos que ela tem exatamente a forma de uma equação de transporte. Assim, a equação de conservação de uma espécie é também chamada de equação de transporte para essa espécie.

2.4 - Tratamento da Turbulência

As equações da mecânica dos fluidos que descrevem os campos de velocidade, pressão e temperatura - equações (2.7) , (2.17) e (2.30) - são válidas para escoamentos em qualquer escala de tempo. A maioria dos escoamentos que encontramos - e nestes inclui-se o escoamento de ar na CLA - ocorrem em regime turbulento. É difícil definir a turbulência, mas é possível citar algumas características dos escoamentos turbulentos. Eles são sempre tridimensionais, irregulares e randômicos, no sentido de que a velocidade varia com o tempo randomicamente em todas as posições. Tais escoamentos apresentam uma série de vórtices (redemoinhos) de tamanhos diversos, desde o próprio tamanho do domínio até vórtices muitas ordens de magnitude menores. Esses vórtices distribuem-se segundo um espectro de frequências. Vórtices maiores têm frequência menor e os menores têm frequências maiores.

As flutuações de velocidade na turbulência resultam em taxas de transferência de quantidade de movimento, calor e massa (ou qualquer outra propriedade escalar) que podem ser muitas ordens de magnitude maiores que aquelas devido ao transporte molecular (ou difusão molecular). De fato, quando porções de fluido deslocam-se em vórtices, levam consigo suas propriedades transportando-as para outra região do escoamento. Neste sentido, o transporte de propriedades pelos vórtices turbulentos é análogo ao transporte difusivo molecular, mas em escala muito maior. Esta analogia interessante motivou o desenvolvimento dos modelos de turbulência ditos de primeira ordem, os quais utilizam o conceito de difusividade turbulenta, como veremos adiante. Cabe aqui ressaltar que os termos primeira e segunda ordem (que utilizamos neste trabalho) não se referem à precisão dos modelos de turbulência, sendo simplesmente a designação usual que encontramos nos trabalhos da área.

Os escoamentos turbulentos são sempre dissipativos no sentido de que continuamente há conversão de energia cinética em energia interna. Desta forma, a menos que energia seja continuamente fornecida, a turbulência decai. As fontes de energia para a turbulência na atmosfera são o cisalhamento do escoamento e em certos casos as forças de empuxo. O cisalhamento é causado pela presença do solo que com suas características de topografia e rugosidade freia ou acelera o escoamento. As forças de empuxo originam-se dos desvios do perfil vertical de temperatura em relação ao perfil para estabilidade neutra, discutido na seção

2.2. Cabe aqui ressaltar que o cisalhamento do escoamento é sempre uma fonte positiva de energia para a turbulência mas os efeitos de empuxo não. Quando a atmosfera está instável (diminuição da temperatura potencial com a altura), as forças de empuxo contribuem para aumentar a turbulência (já que deslocamentos verticais são estimulados) enquanto que em condições estáveis (aumento da temperatura potencial com a altura) as forças de empuxo tendem a reduzir a turbulência (já que deslocamentos verticais são inibidos).

Como as variações espaciais e temporais das componentes da velocidade num escoamento turbulento ocorrem numa escala muito pequena (ainda que muitas vezes maior que as escalas moleculares), a descrição desses movimentos pela equação de Navier-Stokes só seria conseguida se obtivéssemos uma solução analítica ou então uma solução numérica sobre uma malha tão refinada e com intervalos de tempo de avanço da solução tão pequenos que permitissem captar até os menores vórtices do escoamento. A solução analítica ainda não existe e a atual capacidade computacional torna proibitiva a solução numérica direta (*Direct Numerical Simulation* - DNS) para escoamentos de interesse prático.

Como ainda não se consegue resolver os movimentos caóticos irregulares da turbulência, a abordagem utilizada para estudar tais escoamentos é a de se fazer uma descrição estatística do fenómeno. Decompõe-se o valor instantâneo de uma propriedade do escoamento em um valor médio (ou determinístico) e um de flutuação (ou estocástico).

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (2.32)$$

O valor médio deve ser obtido para um intervalo de tempo grande o suficiente para que um número significativo de flutuações seja incluído, mas não tão grande a ponto de mascarar aspectos macroscópicos do problema. Em outras palavras, este intervalo de tempo deve estar numa escala muito maior do que a escala de tempo das flutuações mas também bem menor que a escala de tempo dos fenómenos macroscópicos do problema de interesse. Logo,

$$\bar{\phi}(t) = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} \phi(t') dt' \quad (2.33)$$

De (2.32) e (2.33) temos

$$\overline{\phi'} = 0 \quad (2.34)$$

Quer dizer, a média temporal das flutuações é zero. Observações e medições das variações de velocidades em escoamentos turbulentos mostram que esta abordagem é válida pois os padrões de variação das propriedades repetem-se com certa regularidade tanto no espaço como no tempo.

Uma vez assumido que qualquer propriedade do escoamento turbulento pode ser escrita como em (2.32), substitui-se essa relação (para cada variável) nas equações de conservação - equações (2.7), (2.17) e (2.30) - e faz-se a média temporal (também chamada de promédia) das mesmas no intervalo de tempo T (o mesmo usado na equação 2.33), obtendo-se então novas equações, agora para os valores médios das propriedades neste intervalo, que conterão novos termos representativos do efeito da turbulência sobre o valor médio das propriedades do escoamento. Deve-se aqui observar que procederemos a média temporal sobre as equações adequadamente simplificadas para o caso de escoamentos atmosféricos (seção 2.3.1, equações 2.7, 2.17 e 2.30), e não sobre as equações de conservação na sua forma geral (equações 2.1, 2.2 e 2.3). No nosso caso este procedimento não leva a erros porque as equações estão escritas no sistema cartesiano de coordenadas, bem como porque as análises que levaram à simplificação de termos são igualmente válidas se estes termos contiverem parcelas referentes às flutuações de propriedades (Seinfeld, 1986, cap. 12).

Aplicando esse procedimento à equação (2.7) obtemos

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho \bar{u}_i}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho' u'_i}) = 0 \quad (2.35)$$

O segundo termo de (2.35) será desprezado, pois a variação das flutuações de massa específica em escoamentos atmosféricos são insignificantes (escoamento tipicamente incompressível). A equação de conservação da massa no escoamento turbulento será então

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho \bar{u}_i}) = 0 \quad (2.36)$$

Aplicando o mesmo procedimento de média temporal sobre a equação de Navier-Stokes (2.17) obtemos a equação de conservação da quantidade de movimento para o escoamento turbulento, também chamada de equação de Reynolds.

$$\bar{\rho} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \bar{\rho} \overline{u'_i u'_j} \right) - \bar{\rho} g \delta_{i3} \quad (2.37)$$

Da mesma forma obtemos a partir de (2.30) a equação da energia, escrita em termos da temperatura potencial média e de seu termo de flutuações.

$$\bar{\rho} C_p \left(\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k_s \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j} - \bar{\rho} C_p \overline{u'_j \theta'} \right) \quad (2.38)$$

e, a partir de (2.31), a equação da concentração para escoamento turbulento na atmosfera⁵.

$$\bar{\rho} \left(\frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D_i \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x_j} - \bar{\rho} \overline{u'_j c'_i} \right) + R_i + S_i \quad (2.39)$$

Para a obtenção de (2.37), (2.38) e (2.39) foi utilizada a relação

$$\frac{\partial u'_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.40)$$

obtida subtraindo-se (2.36) de (2.7), o que permitiu passar o termo de flutuações para dentro da derivada. Os novos termos nas equações de transporte (que na equação do movimento é chamado de tensor de Reynolds) envolvem médias de produtos de flutuações de propriedades. Eles representam o efeito da turbulência sobre as propriedades médias do escoamento e precisam ser calculados através de um modelo de turbulência. Neste trabalho utilizaremos um modelo de primeira ordem (ou seja, que utiliza o conceito de difusão turbulenta) a duas equações. As

⁵ Não há soma sobre os índices i (D_i é escalar).

razões para essa escolha serão discutidas mais adiante nesta seção.

Como o nosso objetivo é calcular a dispersão na atmosfera com uma equação como a (2.39), e sabendo que os efeitos turbulentos contribuem como que se aumentasse as características difusivas do fenômeno, não é imprescindível saber quanto valem os termos envolvendo correlações entre flutuações de propriedades, mas sim necessitamos conhecer quantitativamente o efeito dessas flutuações turbulentas sobre o aumento da difusão. Segundo o conceito de difusão turbulenta de Boussinesq (1877), estendido por Kolmogorov, os termos envolvendo flutuações de propriedades em (2.37), (2.38) e (2.39) são modelados em função de gradientes das propriedades médias.

$$\overline{\rho u'_i u'_j} = -\mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{ij} \quad (2.41)$$

$$\overline{\rho C_p u'_j \theta'} = -k_t \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j} \quad (2.42)$$

$$\overline{\rho u'_j c'_i} = -\bar{\rho} D_t \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x_j} \quad (2.43)$$

Desta forma, as equações do movimento, da energia e da concentração na CLA, tornam-se, mediante a substituição de (2.41) a (2.43) em (2.37) a (2.39), respectivamente⁶

$$\bar{\rho} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{p} + \frac{2}{3} \bar{\rho} k \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] - \bar{\rho} g \delta_{i3} \quad (2.44)$$

⁶ Na equação das concentrações não há soma sobre os índices i (D_i é escalar).

$$\bar{\rho} C_p \left(\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(k_a + k_t) \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j} \right] \quad (2.45)$$

$$\bar{\rho} \left(\frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} (D_i + D_t) \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x_j} \right] + R_i + S_i \quad (2.46)$$

Os coeficientes de transporte μ_t , k_t e D_t - respectivamente viscosidade, condutibilidade térmica e coeficiente de difusão mássica turbulentos - são propriedades do escoamento e podem variar no espaço e no tempo. São, na verdade, conceitos "artificiais" baseados na idéia da difusão turbulenta.

A viscosidade de um gás, pela teoria cinética dos gases, é dada por um terço do produto de sua massa específica pelo livre caminho médio e por uma velocidade característica das moléculas. Com isso em mente, Prandlt, em 1925, introduziu o conceito de comprimento de mistura para escoamentos turbulentos. A proposição, provavelmente por analogia à viscosidade dos gases, é de que a viscosidade turbulenta seja dada por

$$\mu_t \propto \rho l v_c \quad (2.47)$$

Para o escoamento turbulento, l é o comprimento de mistura, o que quer dizer, a distância média que os vórtices percorrem sem perder a sua identidade, e v_c é a velocidade característica das flutuações.

Várias maneiras foram propostas para se determinar l e v_c ao longo do escoamento, originando assim diversos modelos de turbulência de primeira ordem. Nos modelos mais simples, também chamados de modelos a zero equação ou modelos algébricos, l é prescrito para cada tipo de escoamento em função de grandezas físicas como distância à parede, largura do jato e outros, de acordo com o tipo de problema. A velocidade v_c é dada pelo produto de l com um gradiente de velocidade médio. Esses modelos são imprecisos e não possuem generalidade (Launder e Spalding, 1972).

Nos modelos a uma equação, a velocidade v_c é calculada através de uma equação diferencial de transporte para a energia cinética turbulenta ($v_c = k^{1/2}$). O comprimento de mistura l continuava algébrico. Os resultados melhoraram pouco em relação aos modelos puramente algébricos, enquanto o esforço computacional cresceu bastante, pois havia mais uma equação no sistema.

Atualmente os modelos mais empregados para escoamentos turbulentos encontrados em problemas de engenharia utilizam-se de duas equações de transporte, uma para calcular a energia cinética turbulenta e outra para o comprimento de escala da turbulência, l . Nesta segunda equação a variável dependente não é necessariamente o próprio l , mas geralmente uma função de k e l . O modelo que utilizaremos tem a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta ($\varepsilon \propto k^{3/2} / l$) calculada pela segunda equação. Launder e Spalding (1974) argumentam que o modelo k - ε , dentre os modelos a duas equações, é o único que não necessita de ajustes em suas constantes, como função da distância da parede, para que a concordância com dados experimentais de diversos tipos de escoamento seja satisfatoriamente obtida. Em outros modelos a duas equações as "constantes" na verdade devem variar em função de uma razão adimensional de acordo com a distância da parede. Assim nos parece que o modelo k - ε tem mais generalidade. Neste ponto é adequado justificarmos a escolha de um modelo de turbulência a duas equações. Basicamente, duas razões nos levaram a essa decisão.

Em primeiro lugar, modelos mais simples - de zero ou uma equação - requerem que o comprimento de escala da turbulência (também chamado comprimento de mistura) seja conhecido em todo o domínio. Esses modelos não fornecem bons resultados quando não se conhece de antemão o comportamento dessa variável, o que é exatamente o caso nos escoamentos atmosféricos sobre terreno complexo (topografia irregular). A prescrição do comprimento de escala da turbulência em função de grandezas físicas do escoamento só é possível em problemas simples (como por exemplo, distância da parede em escoamentos confinados ou sobre placa plana).

Em segundo lugar - sobre a possibilidade de utilizar um modelo mais complexo - não optamos por utilizar um modelo de turbulência de segunda ordem, ou seja, aqueles que calculam as componentes do tensor de Reynolds e os demais fluxos turbulentos (em lugar de utilizar o conceito de difusão turbulenta), devido ao grande aumento do esforço computacional que

teríamos, já que para o escoamento tridimensional que nos propomos resolver teríamos seis equações diferenciais para o transporte das tensões de Reynolds ($\overline{u'_i u'_j}$), três equações para o vetor fluxo de calor turbulento ($\overline{u'_i \theta'}$), uma equação para o produto de flutuações de temperatura ($\overline{\theta'^2}$), três equações para o vetor fluxo de massa turbulento ($\overline{u'_i c'}$), uma equação para o produto de flutuações de concentração por flutuações de temperatura ($\overline{c' \theta'}$) e ainda mais uma equação para a dissipação ε . No total teríamos então treze equações! Seríamos forçados a fazer simplificações no sentido de reduzir esse número, a fim de tornar viável a solução numérica nos computadores disponíveis, o que, na nossa opinião, desconfiguraria o modelo.

Também por razões de limitação computacional não cogitamos em utilizar os modelos de simulação dos grandes vórtices (*large eddy simulation* - LES).

Na próxima seção, a título de revisão, apresentamos o modelo k- ε clássico. A seguir, na seção 2.4.2, apresentamos o modelo k- ε modificado que utilizamos para calcular o escoamento e a concentração de poluentes na CLA.

2.4.1 - O Modelo k- ε Isotrópico

No modelo k- ε tradicional o comprimento de escala da turbulência é dado por

$$l = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \quad (2.48)$$

Substituindo (2.48) em (2.47), com a constante de proporcionalidade igual a $C_\mu^{1/4}$ e $v_c = k^{1/2}$, temos

$$\mu_t = \frac{C_\mu \rho k^2}{\varepsilon} \quad (2.49)$$

Esta é conhecida como a relação de Komogorov-Prandlt. Os coeficientes de transporte (difusivo) turbulento das equações da energia e da concentração são da mesma ordem de grandeza da viscosidade turbulenta μ_t e relacionam-se com esta por

$$\frac{k_t}{C_p} = \frac{\mu_t}{Pr_t} \quad (2.50)$$

$$\bar{\rho} D_t = \frac{\mu_t}{Sc_t} \quad (2.51)$$

onde Pr_t e Sc_t são respectivamente o número de Prandlt e o número de Schmidt turbulentos. Trata-se, na verdade, de constantes do modelo que são ajustadas a partir da comparação de resultados numéricos com dados experimentais.

A equação para a energia cinética turbulenta ($k = \frac{\overline{u'_i u'_i}}{2}$) é obtida a partir da equação de transporte para as tensões de Reynolds ($\overline{u'_i u'_j}$) fazendo-se $i = j$ e modelando-se os termos de transporte difusivo e de dissipação viscosa que introduzem novas correlações desconhecidas (envolvendo flutuações de propriedades). De acordo com Rodi (1980), para altos números de Reynolds, onde a isotropia local da turbulência prevalece, a equação para a energia cinética turbulenta é

$$\bar{\rho} \left(\frac{\partial k}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + P + G - \bar{\rho} \epsilon \quad (2.52)$$

onde

$$P = -\bar{\rho} \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \quad (2.53)$$

é o termo de produção de energia cinética turbulenta a partir da taxa de deformação (cizalhamento) do escoamento médio e

$$G = \bar{\rho} g \beta \overline{w'\theta'} = -g\beta \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (2.54)$$

é o termo de produção ou destruição de energia cinética turbulenta por efeitos de empuxo.

A equação de transporte para a dissipação da energia cinética turbulenta ($\epsilon = \nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}$)

é obtida a partir da equação de Reynolds e contem termos com complexas correlações cujo comportamento é pouco conhecido e para as quais é preciso assumir uma modelação para tornar tratável a equação. De acordo com Rodi (1980) uma vez modelados os termos de difusão, geração e destruição, a equação para a dissipação da energia cinética turbulenta torna-se

$$\bar{\rho} \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} (P + G) - C_{2\epsilon} \bar{\rho} \frac{\epsilon^2}{k} \quad (2.55)$$

As constantes que aparecem no modelo k- ϵ clássico têm seus valores dados pela tabela 2.1.

C_μ	$C_{1\epsilon}$	$C_{2\epsilon}$	σ_k	σ_ϵ
0,09	1,44	1,92	1,0	1,3

Tabela 2.1 - Constantes do modelo k- ϵ clássico (Launder e Spalding, 1974)

Cuidado deve ser dispensado ao valor de C_μ . O valor recomendado por Launder e Spalding (1974) é 0,09. Entretanto uma análise feita para escoamentos atmosféricos revela que este valor é inadequado, como explicado por Raithby et al (1987). Consideremos o escoamento em equilíbrio próximo à superfície onde as tensões cizalhantes são praticamente constantes com a altura e a geração de energia cinética turbulenta é localmente balanceada pela dissipação. Podemos então escrever para a tensão cizalhante na superfície

$$\tau_{z=0} = \tau_0 = \mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \quad (2.56)$$

e para a dissipação

$$\varepsilon \cong \frac{P}{\rho} = \frac{\tau_o}{\rho} \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \quad (2.57)$$

Substituindo μ_t dado por (2.49) em (2.56) e em seguida eliminando ε por (2.57) resulta

$$\frac{1}{\sqrt{C_\mu}} = \frac{k}{u_*^2} \quad (2.58)$$

onde

$$u_* = \sqrt{\frac{\tau_o}{\rho}} \quad (2.59)$$

é a chamada velocidade de fricção:

Panofsky e Dutton (1984) apresentam um resumo de estudos de campo e concluem que $k / u_*^2 \approx 5,48$ para uma grande variedade de condições na camada superficial da atmosfera (porção inferior da CLA próxima à superfície da terra). Este valor de k / u_*^2 substituído em (2.58) resulta $C_\mu = 0,033$, que foi adotado no trabalho de Raithby et al (1987), no qual foi simulado o escoamento sobre o monte Askervein utilizando o modelo k- ε .

Ainda sobre o valor de C_μ , convém citarmos que Dawson (1987) adotou o valor de 0,026 na simulação do escoamento sobre Steptoe Butte (Washington -EUA). Apsley (1995) adota o valor 0,09 na simulação de Cinder Cone Butte (Idaho - EUA) e comenta que alterações nessa constante envolveriam necessariamente otimizações das demais constantes do modelo.

Com relação aos números de Prandtl e Schmidt turbulentos, há discrepâncias nos valores encontrados na literatura. Vemos aí um motivo de dispersão dos resultados calculados por um mesmo modelo, com constantes diferentes. Santos (1992) adota $Pr_t = 0,5$ e $Sc_t = 0,5$. Riopelle et al (1994) adota $Pr_t = 0,614$. Apsley e Castro (1997) utilizam $Pr_t = 0,9$ e $Sc_t = 0,9$.

Daqui para frente quando nos referirmos às propriedades do escoamento (u_i , θ , ρ , p , c e outras) estaremos assumindo que se trata de seus valores médios e não instantâneos, embora, para simplicidade de notação, não utilizaremos mais as barras.

2.4.2 - O Modelo k- ϵ Anisotrópico

Nesta seção apresentamos o modelo de turbulência que utilizamos. Trata-se de uma modificação do k- ϵ clássico, baseada no modelo de tensões de Reynolds algébrico (*algebraic stress model* - ASM).

Em escoamentos ambientais o caráter não isotrópico da turbulência é notável, especialmente nos escoamentos atmosféricos. Esta anisotropia é particularmente importante no caso da dispersão de um escalar (poluente) no escoamento. Para o caso de escoamentos estavelmente estratificados, por exemplo, flutuações verticais são inibidas devido às forças de empuxo (oriundas do gradiente positivo de temperatura na direção vertical), enquanto flutuações horizontais não são. Mesmo escoamentos atmosféricos não estratificados (neutros) apresentam alguma anisotropia. Desta forma, não se pode esperar que modelos isotrópicos possam reproduzir bem a difusão turbulenta não isotrópica. Entretanto, o k- ϵ clássico, que é um modelo isotrópico, é aplicado com sucesso para o cálculo de escoamentos ambientais onde gradientes horizontais (de velocidade, temperatura e propriedades turbulentas) são pequenos em relação aos gradientes verticais. Nessas situações, a difusão turbulenta é significativa somente na direção vertical, e um modelo isotrópico pode tratá-la adequadamente. De outro lado, no problema da dispersão de poluentes de fontes pontuais, ambos os gradientes de concentração, na direção horizontal e na vertical, são igualmente significativos. Logo, também o é a difusão turbulenta. Para essas situações, uma melhor descrição da anisotropia nas trocas turbulentas é necessária.

Em sua tese de doutorado, Koo (1993) propôs uma modificação no modelo k- ϵ clássico, baseada no modelo algébrico de tensões de Reynolds, incluindo efeitos de proximidade do solo. A característica principal desse modelo modificado, e que bastante o diferencia do k- ϵ clássico, é o fato dele ser anisotrópico. O modelo de Koo foi comparado com dados experimentais e

numéricos (de modelos mais complexos) em escoamentos unidimensionais na camada limite atmosférica, sob condição estável, neutra e instável. O modelo reproduziu bem os comportamentos observados. Em escoamentos bidimensionais o modelo foi aplicado para simular a circulação da brisa mar-terra e para estimar a dispersão de poluentes nesse tipo de situação.

Em nosso trabalho estendemos a aplicação do modelo k-ε anisotrópico de Koo para problemas tridimensionais de escoamento e dispersão de poluentes. Uma descrição deste k-ε modificado é feita a seguir, enquanto que a sua obtenção (a partir do modelo algébrico de tensões de Reynolds) encontra-se no apêndice A.

De acordo com o conceito de viscosidade turbulenta de Boussinesq, as tensões de Reynolds são relacionadas com gradientes da velocidade média por

$$-\overline{u'_i u'_j} = K_m^j \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \quad (2.60)$$

K_m^j é o coeficiente de transporte difusivo turbulento de quantidade de movimento (“viscosidade cinemática turbulenta”) na direção j . Como já dissemos, não é uma característica do fluido mas uma propriedade do escoamento, fortemente dependente do estado de turbulência.

Analogamente ao que foi feito para o transporte turbulento de quantidade de movimento, o conceito de difusividade turbulenta assume que o transporte turbulento de calor ou massa (espécies químicas) seja relacionado aos gradientes da propriedade transportada.

$$-\overline{u'_j \theta'} = K_h^j \frac{\partial \theta}{\partial x_j} \quad (2.61)$$

$$-\overline{u'_j c'} = K_c^j \frac{\partial c}{\partial x_j} \quad (2.62)$$

K_h^j e K_c^j são, respectivamente, os coeficientes de transporte difusivo turbulento de calor e massa na direção j . São também chamados de difusividade turbulenta. As viscosidades

turbulentas (para momento) e difusividades turbulentas (para calor e massa) são expressos em função da energia cinética turbulenta e da sua taxa de dissipação. Para a direção vertical temos

$$K_m^z = C_m \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.63)$$

$$K_h^z = C_h \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.64)$$

$$K_c^z = C_c \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.65)$$

E para as direções horizontais

$$K_m^x = K_m^y = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.66)$$

$$K_h^x = K_h^y = \frac{K_m^x}{Pr_t} \quad (2.67)$$

$$K_c^x = K_c^y = \frac{K_m^x}{Sc_t} \quad (2.68)$$

C_m , C_h e C_c são coeficientes de proporcionalidade para a viscosidade e as difusividades turbulentas na direção vertical. Eles são definidos por funções da estrutura do escoamento, a partir do modelo algébrico de tensões.

$$C_m = \frac{2}{3} \frac{(c_1 - 1)(E_7 - A G_H)}{E_4 + \frac{E_4 E_8}{C_{IT}} G_H - E_5 E_7 G_M + E_5 A G_H G_M} \quad (2.69)$$

$$C_h = \frac{2}{3} \frac{(c_1 - 1) + E_5 G_M C_m}{(c_{IT} + c'_{IT} f) E_4 + \left(\frac{2E_4 E_9}{E_{10}} + E_6 \right) G_H} \quad (2.70)$$

Panofsky e Dutton (1984), e Hanna (1982) comentam que, na ausência de melhores informações, é razoável que se adote a mesma difusividade turbulenta do calor para o transporte de outros escalares. Isso implica em que os números de Prandtl e Schmidt turbulentos sejam iguais e que $C_c = C_h$. O efeito da proximidade do solo sobre as tensões de Reynolds é considerado no parâmetro

$$f = \frac{C_\varepsilon k^{3/2}}{k_v z \varepsilon} \quad (2.71)$$

onde z é a distância do solo e $C_\varepsilon = 0.13$, o mesmo valor adotado por Koo (1993). As demais constantes em (2.69) e (2.70) estão no apêndice A.

C_m e C_h são funções de G_M e G_H . Estes últimos são parâmetros adimensionais que levam em conta, respectivamente, a taxa de cisalhamento e a estratificação do escoamento na direção vertical.

$$G_M = \left(\frac{k}{\varepsilon} \right)^2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right] \quad (2.72)$$

$$G_H = g\beta \left(\frac{k}{\varepsilon} \right)^2 \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (2.73)$$

A energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação são calculadas pelas suas equações de conservação.

$$\frac{\partial k}{\partial t} + u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{K_m^j}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + P + G - \varepsilon \quad (2.74)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + u_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{K_m^j}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_{1\varepsilon} (P + G) \frac{\varepsilon}{k} - C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.75)$$

P é o termo de produção devido aos gradientes de velocidade.

$$P = -\overline{u'_i u'_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = K_m^j \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (2.76)$$

G é o termo de produção ou destruição devido aos efeitos de empuxo (estratificação).

$$G = g\beta \overline{w'\theta'} = -g\beta K_h^z \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (2.77)$$

As constantes das equações (2.74) e (2.75) são as mesmas do k-ε clássico que foram listadas na seção anterior.

2.5 - Efluentes Com Material Particulado

Uma grande parte dos efluentes lançados na atmosfera constitui-se, além de matéria gasosa, também de partículas sólidas de tamanho microscópico ou submicroscópico que são lançadas juntamente com os gases. Essas partículas geralmente são de tamanho suficientemente pequeno (0,1 a 100 μm), o que nos permite descrever o seu comportamento em conjunto como sendo o de um meio contínuo. É justamente esse o tratamento que daremos ao material particulado.

Partículas suspensas num fluido realizam movimentos irregulares randômicos, devido aos choques com as moléculas do fluido. Tal movimentação é denominada de movimento Browniano. Consideremos uma partícula de aerossol suspensa no ar estagnado, caindo sob ação de seu peso. Em um dado tempo, após o início de sua queda, a partícula atinge uma certa velocidade de equilíbrio que permanece constante. Tal velocidade é denominada de velocidade

terminal, v_t , obtida através da consideração do equilíbrio entre o peso da partícula e a força de arrasto sobre ela (Seinfeld, 1986, cap.8).

$$v_t = t_p g = \frac{D_p^2 \rho_p g C_c}{18 \mu} \quad (2.78)$$

onde C_c é o fator de correção de Cunningham, que considera efeitos do não contínuo, que se tornam importantes quando o tamanho da partícula se torna comparável ao livre caminho médio das moléculas do meio (ar), que é dado por

$$C_c = 1 + \frac{2\lambda}{D_p} \left[1.257 + 0.4 \exp\left(\frac{-1.1 D_p}{2\lambda}\right) \right] \quad (2.79)$$

O movimento Browniano de partículas pode ser descrito como um processo de difusão (Seinfeld, 1986). Assim podemos assumir que a concentração de partículas sob movimento Browniano é governada pela equação da difusão

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \nabla^2 c \quad (2.80)$$

onde D é a difusividade Browniana dada por

$$D = \frac{k_B T C_c}{3\pi \mu D_p} \quad (2.81)$$

Esta expressão, sem o coeficiente C_c , é conhecida como a relação de Stokes-Einstein. A tabela 2.2 nos dá uma idéia da magnitude da velocidade terminal, do tempo necessário para o seu alcance (t_p) e da difusividade Browniana para partículas com $\rho_p = 1 \text{ g/cm}^3$ e $T=293\text{K}$.

O material particulado lançado na atmosfera está sujeito aos efeitos do escoamento turbulento desta e portanto, como outros escalares, tem o seu coeficiente de difusão muitas vezes intensificado pelo caráter dispersivo da turbulência. A difusividade Browniana exerce papel importante somente na subcamada limite viscosa da atmosfera, que é da ordem de alguns

D_p (μm)	v_t (cm/s)	D (cm^2/s)	t_p (s)	C_c
0,1	8,62e-5	6,75e-6	9,2e-8	2,85
0,5	1,0e-3	6,32e-7	1,0e-6	1,326
1	3,52e-3	2,77e-7	3,6e-6	1,164
5	7,8e-2	4,92e-8	7,9e-5	1,032
10	3,07e-1	2,42e-8	3,1e-4	1,016
20	1,22	1,2e-8	1,2e-3	1,008
50	7,58	4,78e-9	7,7e-3	1,003
100	30,3	2,38e-9	3,1e-2	1,0016

Tabela 2.2 - Características dos particulados em função de seu diâmetro

milímetros imediatamente acima do solo. Na região turbulenta, assume-se que o material particulado tem a mesma difusividade turbulenta de massa que uma espécie puramente gasosa.

Observando a tabela 2.2 notamos que a velocidade terminal aumenta sensivelmente com o tamanho da partícula. Para partículas consideradas grandes ($>1 \mu\text{m}$) o efeito gravitacional é significativo sobre o transporte e a deposição da partícula, mesmo na escala de tempo dos problemas na microescala atmosférica. O efeito da velocidade terminal é levado em consideração pela sua introdução no termo convectivo da equação da concentração. À componente vertical da velocidade é somada a velocidade terminal.

A equação de transporte para um poluente particulado é então

$$\frac{\partial c}{\partial t} + (u_j - v_t \delta_{j3}) \frac{\partial c}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K_c^j \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) + S \quad (2.82)$$

Até agora temos caracterizado o material particulado pelo seu tamanho D_p , que seria o diâmetro de uma partícula esférica de mesma massa específica e mesmo volume. Na realidade as partículas não são todas desse mesmo tamanho mas sim sua população apresenta uma

distribuição de tamanhos $N(D_p)$, onde $N(D_p) dD_p$ é o número de partículas por unidade de volume de ar com diâmetros na faixa de D_p até D_p+dD_p . Consideramos como tamanho característico da população o seu tamanho médio, baseado na distribuição de volumes. Assim, uma vez conhecida a distribuição $N(D_p)$ da população de particulados, o seu tamanho característico é dado por

$$D_p^3 = \frac{\int_0^{\infty} D_p'^3 N(D_p') dD_p'}{\int_0^{\infty} N(D_p') dD_p'} \quad (2.83)$$

Na expressão acima o denominador representa o número total de partículas (por unidade de volume).

Entendemos que este diâmetro característico, que é na verdade um diâmetro médio ponderado pela massa das partículas (já que $\rho_p = \text{constante}$), é o que melhor reflete o comportamento do conjunto de particulados. Caso o efluente lançado contenha grupos de particulados com características muito distintas (com relação a tamanho e massa específica) é necessário então tratá-los separadamente como poluentes distintos.

CAPÍTULO TRÊS

TRATAMENTO DOS FENÔMENOS ATMOSFÉRICOS RELEVANTES

Além do fenômeno da turbulência, que é um dos mais importantes a serem considerados para a previsão da dispersão na atmosfera, há outros fenômenos e considerações que devem ser levados em conta num modelo que pretende obter previsão das concentrações dos poluentes dentro de níveis de confiabilidade satisfatórios do ponto de vista de engenharia ambiental. Tais aspectos importantes já foram citados quando colocamos os objetivos da tese seção 1.4). A seguir mostramos como é possível incorporar ao modelo esses fenômenos atmosféricos relevantes.

A topografia do terreno pode ser muito bem aproximada já que utilizamos no método numérico um sistema de coordenadas coincidente com as fronteiras do domínio, o qual permite tratar muito bem escoamentos tridimensionais sobre topografia complexa. Melhores esclarecimentos são dados no capítulo 4, dedicado à metodologia de solução. Na verdade, em modelos numéricos a dificuldade principal em considerar topografias complexas está no método de solução das equações do modelo e não propriamente na sua proposição.

A intensidade e direção do vento são fatores primordiais na distribuição das concentrações. Nosso modelo utiliza como dados de entrada esses fatores, os quais podem ser obtidos a partir de medições na região de interesse ou então da rosa dos ventos dessa região, a qual deve mostrar a distribuição dos ventos ao longo do ano, segundo suas intensidades e direções. Faz-se então necessário estudar diversas combinações de direção e intensidade de ventos para determinar-se as situações potencialmente críticas, com respeito a altas concentrações, caso se deseje fazer a previsão da qualidade do ar ou do impacto de uma determinada fonte de poluentes.

A interação da pluma com o ambiente de descarga é prevista pela própria solução do escoamento. Naturalmente a malha deve ser mais refinada nas proximidades das fontes para que a interação da descarga com o escoamento livre seja melhor prevista. Como estamos resolvendo também a equação da energia, além dos efeitos de inércia devido à velocidade de descarga, também podem ser considerados os efeitos de empuxo do jato. Ambos contribuem decisivamente sobre a altura que a pluma atinge e a distância percorrida até que esta tome a direção do vento.

3.1 - A Estabilidade Atmosférica

Conforme já comentamos, quando falamos da turbulência na atmosfera, raramente esta se encontra em condições de estabilidade neutra, ou seja, com um gradiente vertical de temperatura igual ao perfil adiabático, $\partial T / \partial z = -\Gamma$ (que resulta para atmosfera seca, aproximadamente, $-1^\circ \text{C} / 100 \text{ m}$). A condição de estabilidade atmosférica é determinada pelo gradiente vertical de temperatura. Seria então ideal para um modelo de dispersão que se dispusesse de valores do perfil de temperatura medidos em campo para se conhecer as condições de estabilidade reais. No entanto, na maioria dos casos não se dispõe dessa informação. Neste caso deve-se estimar esse gradiente de temperatura para se poder aplicar condições de contorno para a equação da energia. As classes de estabilidade propostas por Pasquill (1961), podem ser utilizadas para tais estimativas e estão na tabela 3.1 .

Veloc. do Vento a 10m do Solo	Radiação Solar (W/m ²)			Fração de Cobertura de Nuvens à Noite	
(m/s)	>700	350 a 700	<350	>50%	<50%
<2	A	A-B	B		
2-3	A-B	B	C	E	F
3-5	B	B-C	C	D	E
5-6	C	C-D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D
A : extremamente instável B : moderadamente instável C : fracamente instável			D : neutra E : fracamente estável F : moderadamente estável		

Tabela 3.1 - Classes de estabilidade de Pasquill

Seinfeld (1986) apresenta uma relação entre as classes de estabilidade de Pasquill e o gradiente vertical de temperatura, mostrada na tabela 3.2 .

Como já vimos na seção 2.3.1 (Equações da Mecânica dos Fluidos Para a Atmosfera), $\partial\theta/\partial z$ é uma medida do afastamento do perfil de temperatura em relação às condições adiabáticas, como mostra a equação (2.26). A atmosfera está em condição de estabilidade neutra quando $\partial\theta/\partial z = 0$, em condição instável quando $\partial\theta/\partial z < 0$ e em condição estável quando $\partial\theta/\partial z > 0$. Do ponto de vista da dispersão de poluentes, a atmosfera estável é, geralmente, a mais desfavorável, pois a turbulência é inibida por efeitos de empuxo o que faz diminuir o coeficiente de difusão mássica turbulento, reduzindo a dispersão da pluma e consequentemente aumentando as concentrações.

Estabilidade	$\frac{\partial T}{\partial z}$ (°C / 100 m)	$\frac{\partial \theta}{\partial z}$ (°C / 100 m)
A	< -1,9	< -0,9
B	-1,9 a -1,7	-0,9 a -0,7
C	-1,7 a -1,5	-0,7 a -0,5
D	-1,5 a -0,5	-0,5 a 0,5
E	-0,5 a 1,5	0,5 a 2,5
F	> 1,5	> 2,5

Tabela 3.2 - Relação entre classes de estabilidade e estratificação da temperatura

3.2 - A Camada Limite Atmosférica

A porção da atmosfera próxima ao solo é a chamada camada limite atmosférica (CLA), tipicamente os primeiros 1000 m acima da superfície da Terra. Esta é a região na qual a atmosfera sente os efeitos da presença do solo, através da troca vertical de quantidade de movimento, calor e umidade. Esta camada também é denominada camada limite planetária ou ainda camada de fricção.

A estrutura da CLA sobre o continente é fortemente influenciada pelo ciclo diário de aquecimento e resfriamento do solo. A figura 3.1 mostra uma estrutura típica que se desenvolve ao longo de um dia. Os três componentes que mais se destacam nessa estrutura (Stull, 1988) são a camada de mistura (*convective mixed layer*, durante o dia), a camada residual e a camada estável (durante a noite). A figura 3.2 mostra a variação dos perfis de temperatura potencial ao longo de um ciclo diário, correspondentes às horas do dia marcadas figura 3.1 .

A espessura da CLA (h) compreende a região turbulenta adjacente ao solo. À noite, com ventos fracos, a espessura da camada turbulenta é muito menor que durante o dia, até menos de 100 m. A influência do resfriamento do solo, que ocorre durante a noite por emissão de radiação infravermelha, é a causa desta diminuição da espessura da camada turbulenta, ou

camada de mistura (*mixing layer*). Com o solo mais frio, há um fluxo de calor da atmosfera para este, originando um gradiente vertical positivo de temperatura, ou seja, uma camada de ar estavelmente estratificada próxima do solo. Esta camada, que é denominada de camada limite estável noturna, cresce durante toda a noite. Quando amanhece, a superfície é aquecida pela radiação solar e sua temperatura cresce atingindo um máximo por volta das 12 às 14 horas. A camada de ar acima do solo recebe um fluxo de calor da superfície e se aquece também, resultando num gradiente vertical negativo de temperatura que vai destruindo a camada estável noturna. Esta nova camada instável que vai se formando tem nível de intensidade turbulenta alto (devido aos efeitos de cisalhamento e empuxo expressivos próximo ao solo) e aumenta de espessura durante todo o período matutino, acompanhando o aumento da temperatura do solo. À tarde a temperatura do solo começa a diminuir e também o faz a altura da camada turbulenta. Em tardes de vento, particularmente com nuvens espessas, a CLA é completamente turbulenta e sua altura é determinada pela velocidade do vento e a rugosidade da superfície.

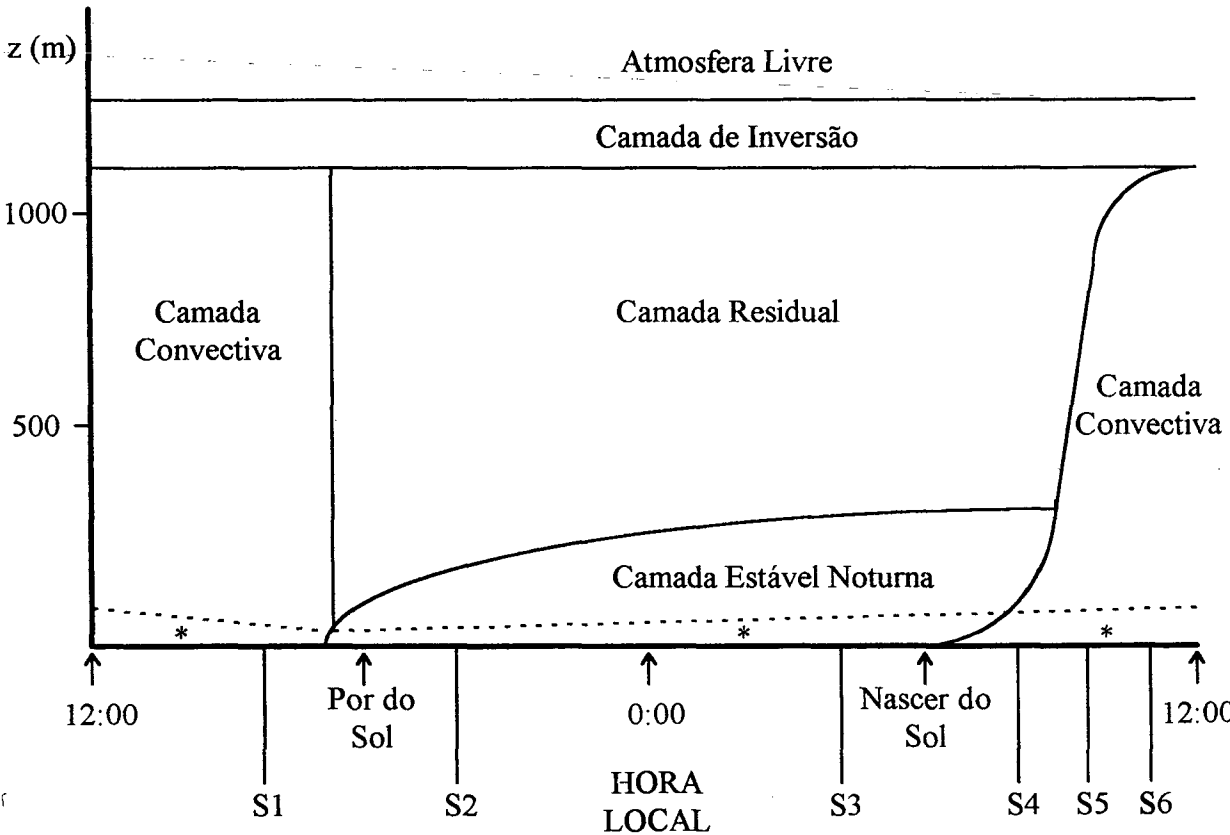


Figura 3.1 - O ciclo diário de evolução da CLA - (*) Indica a camada superficial (os marcadores de tempo S1 a S6 são referências para os perfis da figura 3.2)

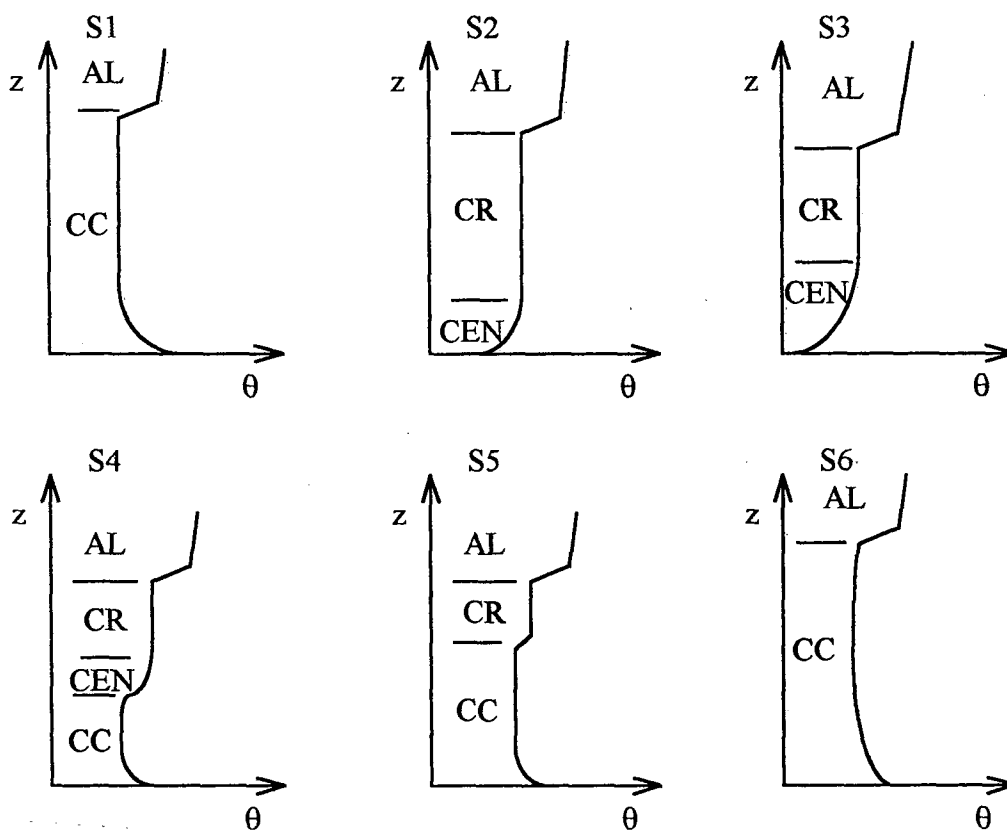


Figura 3.2- Perfis de temperatura potencial na CLA ao longo de um dia (as situações S1 a S6 estão definidos na figura 3.1). AL é atmosfera livre, CC é camada convectiva, CR é camada residual, CEN é camada estável noturna

Uma outra maneira de descrever a espessura da CLA é limita-la a uma altura z_i da base da camada de inversão térmica. Tipicamente (para condições neutras e instáveis) a temperatura diminui até uma dada altura na CLA e em seguida aumenta quando se penetra na camada de inversão, que está imediatamente acima da CLA. Na camada de inversão, que é uma camada altamente estável, a turbulência é suprimida por efeitos de empuxo. Durante o dia podemos dizer que a altura da CLA (h) é aproximadamente igual a altura da base da inversão (z_i). Na verdade, h tende a ser uns 10% maior que z_i porque a parte inferior da camada de inversão ainda é turbulenta por interar-se com o escoamento turbulento logo abaixo dela e também porque geralmente há forte cisalhamento por mudanças na velocidade e direção do vento na inversão.

À noite, a inversão frequentemente estende-se até o solo, porque este se resfria rapidamente emitindo radiação infravermelha. Quando o vento é forte, turbulência de origem mecânica (cisalhamento do escoamento) é criada e calor da atmosfera é entregue ao solo por

difusão turbulenta através de toda a CLA. Entretanto, em noites claras com ventos fracos somente a parte inferior, mais próxima do solo, é turbulenta. A parte superior resfria-se emitindo radiação infravermelha para o espaço. Sob tais condições a altura da camada turbulenta, h , e a altura da CLA, z_i (neste caso o topo da região de inversão), podem ser bem diferentes, como descrevem Panofsky e Dutton (1984). A figura 3.3 ilustra a questão da altura da CLA e a altura da camada de inversão, durante o dia e durante a noite.

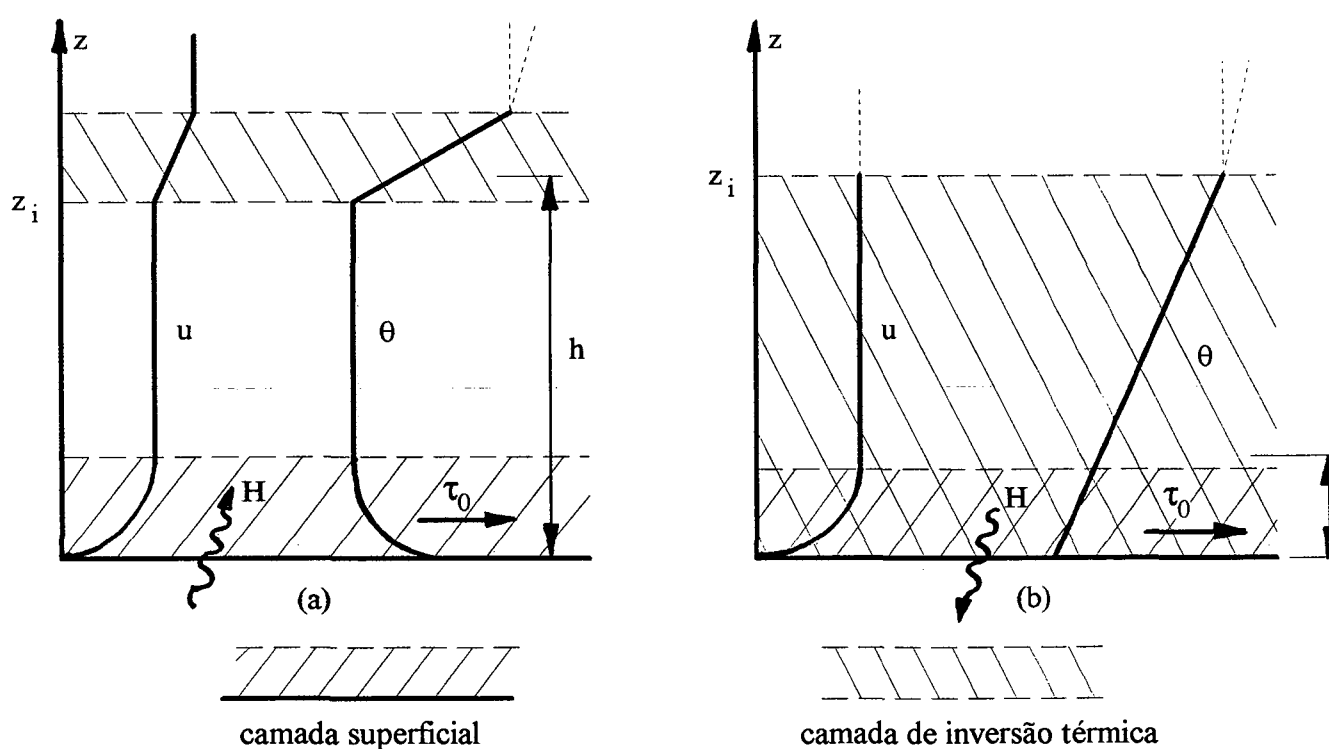


Figura 3.3 - A camada limite atmosférica, (a) diurna e (b) noturna

3.3 - A Camada Superficial

A parte inferior da CLA é chamada de camada superficial (*surface layer*). Nesta camada as características da turbulência e o perfil vertical das variáveis médias do escoamento são relativamente simples. Não há uma definição precisa para a camada superficial. Qualitativamente,

a camada superficial é a parte da CLA imediatamente acima da superfície, onde as variações dos fluxos verticais podem ser ignorados. Dessa forma, o fluxo de quantidade de movimento (tensão cizalhante), o fluxo de calor e o de umidade são tratados como constantes dentro dessa camada.

Tipicamente os fluxos são grandes na superfície do solo e reduzem-se a zero próximo ao topo da CLA. Se a diminuição dos fluxos com a altura é linear (o que é uma boa aproximação no caso de terreno plano), então os fluxos diminuem a uma taxa de 10% nos primeiros 10% da CLA. Uma variação de 10% nos fluxos pode geralmente ser tolerada, mesmo quando os mesmos são tratados como constantes. Assim, a suposição de que a camada superficial ocupa os 10% inferiores (com relação a altura) da CLA é bastante razoável. Adotamos então a definição de Panofsky e Dutton (1984), de que a camada superficial é a porção inferior da CLA, com espessura de 10% da espessura desta.

A camada superficial é às vezes chamada de camada de tensões constantes, o que não é apropriado. Como vimos acima, as tensões e os demais fluxos turbulentos variam com a altura, mas essa variação não é significativa. Assim, as tensões cizalhantes (τ_0) e o fluxo de calor vertical (H) são considerados constantes na camada superficial. Tomando proveito desta peculiaridade, Monin e Obukhov propuseram em 1954 sua teoria da similaridade para a camada superficial da atmosfera. Introduziram dois parâmetros de escala, independentes da altura nessa camada. Uma velocidade característica - a velocidade de fricção (u_*) - e um comprimento característico - o chamado comprimento de Monin-Obukhov (L), definidos como segue.

$$u_* = \sqrt{\frac{\tau_0}{\rho}} \quad (3.1)$$

$$L = \frac{-\rho C_p T_0 u_*^3}{k_v g H} \quad (3.2)$$

De acordo com Seinfeld (1986), L pode ser interpretado como a altura acima do solo na qual há um equilíbrio entre produção de energia cinética turbulenta por efeitos mecânicos (cizalhamento) e a sua destruição por efeitos de empuxo. Para Panofsky e Dutton (1984), quando $L < 0$ (geralmente em dias de sol) a alturas maiores que $|L|/10$ a convecção por efeitos

de empuxo domina o escoamento e para alturas menores que $|L|/10$ a turbulência mecânica é predominante. Seinfeld (1986) também relaciona L com a estabilidade atmosférica, como mostrado na tabela 3.3 .

Estabilidade	L (m)
Muito instável - A	$-100 < L < 0$
Instável - B , C	$-10^5 < L < -100$
Neutra - D	$ L > 10^5$
Estável - E	$10 < L < 10^5$
Muito estável - F	$0 < L < 10$

Tabela 3.3 - Interpretação do comprimento de Monin-Obukhov com relação à estabilidade

A porção entre a camada superficial e o topo da CLA no período diurno é usualmente chamada de camada de mistura (*mixing layer*). Nela há muito pouca variação vertical da velocidade do vento e da temperatura potencial. Durante a noite esta camada é denominada de camada estável noturna, uma vez que ela está contida na região de inversão térmica.

3.4 - A Altura da Camada Limite Atmosférica

A altura da CLA é um fator importante para os modelos de dispersão atmosférica já que a dispersão de substâncias na microescala atmosférica restringe-se a esta camada, onde o nível de turbulência relativamente alto é responsável pela diluição dos contaminantes. Durante o dia a camada de inversão residente logo acima da CLA funciona de fato como uma barreira à dispersão vertical. À noite a camada estável só é turbulenta próximo do solo (onde a produção mecânica de turbulência por efeitos de cisalhamento do escoamento compensa os efeitos de

empuxo), pois as forças de empuxo inibem rapidamente a turbulência à medida em que se afasta do solo, reduzindo sensivelmente a altura da camada limite atmosférica noturna. Assim, na microescala atmosférica a dispersão vertical está limitada à altura da CLA, pois o rápido decaimento do nível de turbulência para alturas superiores àquela torna o escoamento praticamente laminar e com velocidade vertical muito pequena de maneira que o transporte de substâncias para camadas mais altas da atmosfera (acima da CLA) seja muitíssimo lento, a ponto de ter efeitos significativos apenas quando se trata de fenômenos de meso ou macroescala atmosférica, nas quais a escala de tempo é bem maior.

Em nosso modelo de dispersão, à semelhança do que ocorre em modelos que resolvem numericamente as equações governantes dos fenômenos envolvidos, a altura da CLA (h) representa a altura do domínio de cálculo da solução (ver figura 2.1). Esta é portanto uma informação que vai alimentar o modelo. Novamente, como no caso do perfil vertical de temperatura, seria desejável dispor-se de valores medidos em campo sobre a variação diária e sazonal da altura da CLA, ou camada de mistura. Se isto for possível, obviamente esperam-se resultados mais confiáveis do modelo de dispersão. No entanto, na maioria das situações, e no Brasil é freqüente, não se dispõe desses levantamentos de campo. Faz-se então necessário utilizar estimativas ou modelos para prever a altura da CLA. Rayner e Watson (1991) apresentam um modelo para prever a evolução temporal da CLA durante o período diurno baseado na solução das equações da energia, movimento e energia cinética turbulenta em suas versões unidimensionais na atmosfera. Lee (1986) propõe um modelo para prever o fluxo de calor na superfície, a velocidade de fricção e a altura da CLA utilizando dados meteorológicos de radiação solar, temperatura do ar, velocidade do vento e sondagem por radiosonda. Stull (1983) estudou o comportamento da CLA durante a noite e apresenta relações empíricas para a altura h e a variação total $\Delta\theta$ da temperatura potencial através da camada de inversão noturna. Uma vez que se disponha, a partir de estações meteorológicas, dos parâmetros que esses modelos requerem então a altura da CLA pode ser considerada com boa precisão.

Caso não se disponha de maiores dados meteorológicos, a altura da CLA sob condições neutras pode ser estimada, de acordo com Blackadar e Tennekes (1968), por

$$h = \alpha \frac{u_*}{f} \quad (3.3)$$

onde α é uma constante, com valor de 0,15 a 0,25 segundo Panofsky e Dutton (1984), e $f = 2\Omega \sin \varphi$ é o parâmetro de Coriolis. Para condições não neutras, Zilitinkevich (1972) estima

$$h = \begin{cases} \alpha \left(-\frac{u_*}{f L^{1/3}} \right)^{3/2} & (\text{instável}) \\ \alpha \left(\frac{u_* L}{f} \right)^{1/2} & (\text{estável}) \end{cases} \quad (3.4)$$

Se o fluxo de calor na camada superficial (H) e o gradiente de temperatura da inversão noturna ($\partial\theta/\partial z$) forem conhecidos, uma equação simples para prever h em condições instáveis (tipicamente pela manhã) pode ser obtida através de um balanço de energia na CLA. Consideremos a figura 3.4, na qual a reta AB representa o perfil de temperatura decorrente de uma camada de inversão que desenvolveu-se durante a noite. Algum tempo após o nascer do sol, o aquecimento provindo do solo criou um perfil de temperatura adiabático (neutro) CD, a partir da superfície até uma altura z_i , base da inversão subsistente.

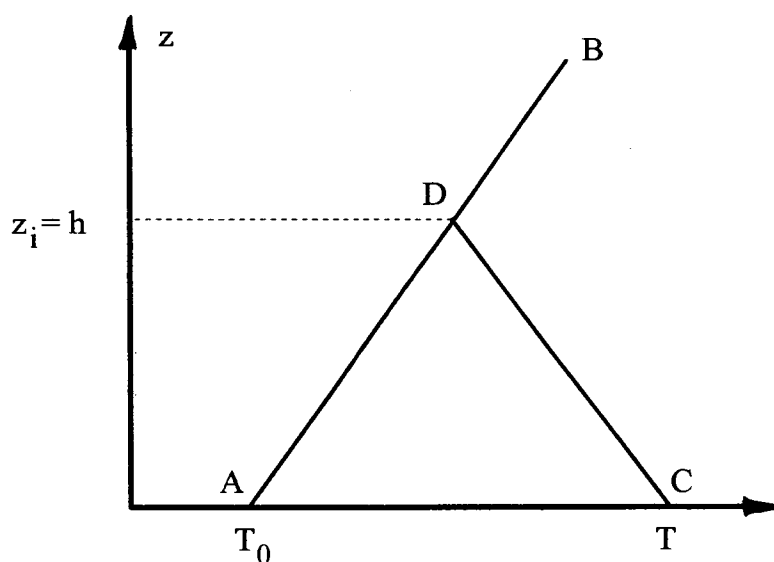


Figura 3.4 - Perfis de temperatura antes do amanhecer (AB) e algum tempo após o nascer do sol (CDB)

Da figura acima temos

$$\Gamma - \Gamma_i = \frac{T - T_0}{h} \quad (3.5)$$

Γ_i é o gradiente de temperatura na inversão ($-\partial T/\partial z$ para o perfil AB). A conservação da energia no triângulo ACD, considerando o problema unidimensional em z e fluxo de calor nulo em $z = z_i$, requer

$$\int_{t_0}^t H dt = \rho C_p \frac{h(T - T_0)}{2} \quad (3.6)$$

Eliminando $T - T_0$ em (3.6) a partir de (3.5) temos

$$h = \left(\frac{2 \int_{t_0}^t H dt}{\rho C_p (\Gamma - \Gamma_i)} \right)^{1/2} \quad (3.7)$$

No início da manhã o aumento do fluxo de calor H é aproximadamente linear com o tempo e então a altura da CLA também aumenta de forma aproximadamente linear. No decorrer do dia h continua a crescer mas a uma taxa menor. Em uma tarde de um dia ensolarado a altura da CLA situa-se entre 1 e 2 km.

3.5 - O Comprimento de Monin-Obukhov

Notamos nas equações da seção anterior a presença dos parâmetros u_* (velocidade de fricção) e L (comprimento de Monin-Obukhov) da teoria de Monin-Obukhov, para os quais ainda não temos uma avaliação quantitativa, já que não conhecemos o fluxo de calor (H) e a tensão cizalhante (τ_0) ao nível do solo, pois na verdade não é comum se dispor desses dados como resultados de medições rotineiras em estações meteorológicas. É importante aqui frisar

que a única maneira confiável de se conhecer u_* e L é calculá-los a partir de medições de campo de H e τ_0 . Note que a determinação de τ_0 requer a medição do fluxo turbulento $\overline{u'w'}$.

Prosseguimos então em nossa linha de pensamento de que o modelo de dispersão deve permitir ser alimentado por dados que possam, mesmo que de maneira aproximada, ser estimados a partir de um número mínimo de parâmetros atmosféricos sempre disponíveis.

Golder (1972) apresenta uma série de curvas que relacionam as classes de estabilidade de Pasquill, a rugosidade do terreno (z_0) e o comprimento de Monin-Obukhov (L), como mostra a figura 3.5 oitavo. Essas curvas foram aproximadas por Golder (1972) pela correlação

$$L^{-1} = a + b \log z_0 \quad (3.8)$$

onde os valores das constantes "a" e "b" dependem da classe de estabilidade, como mostra a tabela 3.4 .

Estabilidade	Coeficientes	
	a	b
A	-0,096	0,029
B	-0,037	0,029
C	-0,002	0,018
D	0	0
E	0,004	-0,018
F	0,035	-0,036

Tabela 3.4 - Coeficientes para a correlação dada por (3.8)

O parâmetro z_0 é uma medida da rugosidade do terreno. Fisicamente z_0 representa o tamanho dos vórtices turbulentos na superfície. Típicos valores de rugosidade são dados na tabela 3.5 .

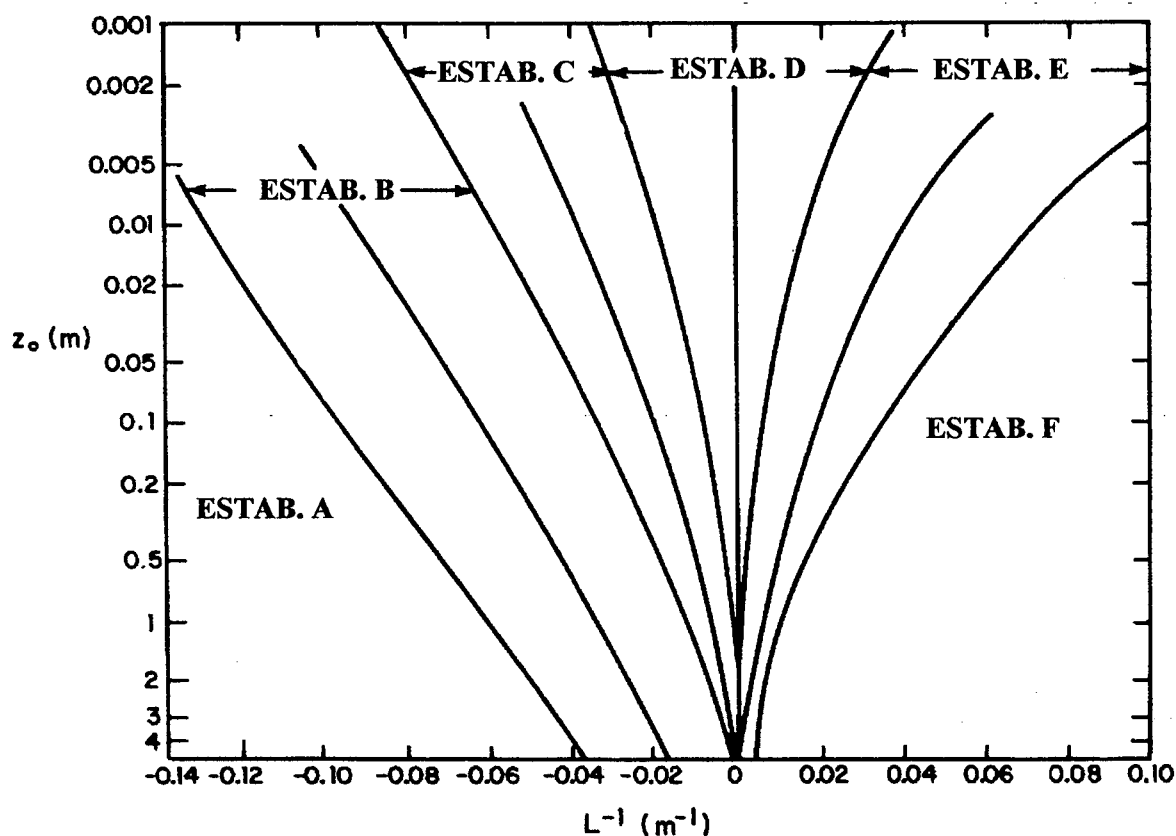


Figura 3.5 - Relação entre o comprimento de Monin-Obukhov, a rugosidade do terreno e as classes de estabilidade de Pasquill

Superfície	z_0 (m)
Lisa (gelo)	10^{-5}
Neve	10^{-4}
Mar calmo	10^{-3}
Deserto plano	10^{-3}
Gramma baixa (3 cm)	10^{-2}
Gramma alta, pasto (60 cm)	0,05
Plantações desenvolvidas	0,1
Cobertura de árvores	1
Áreas residenciais baixas	2
Centros urbanos	5 a 10

Tabela 3.5 - Comprimento de rugosidade para várias superfícies (Seinfeld, 1986)

3.6 - Perfis de Velocidade e Temperatura na Camada Superficial

A teoria de Monin-Obukhov apresenta uma relação para o perfil vertical de velocidade na camada superficial atmosférica dada por

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{u_*}{k_v z} \phi_m \left(\frac{z}{L} \right) \quad (3.9)$$

ϕ_m é presumivelmente uma função universal dependente só da estabilidade atmosférica, obtida a partir de extensos experimentos de campo. Para condições instáveis a relação mais usada é (Bussinger et al, 1971)

$$\phi_m = \left(1 - 15 \frac{z}{L}\right)^{-1/4} \quad (3.10)$$

Para condições neutras $\phi_m = 1$ e para condições estáveis

$$\phi_m = 1 + 4.7 \frac{z}{L} \quad (3.11)$$

Panofsky e Dutton (1984) comentam que a constante em (3.11) pode variar de 4,7 a 5,2 e sugere o valor 5. Uma vez conhecida ϕ_m , (3.9) pode ser integrada desde $z = z_0$ (onde $u = 0$) até z , resultando uma expressão para a velocidade de fricção, como também um perfil para a variação vertical da velocidade na camada superficial.

$$u(z) = \frac{u_*}{k_v} \left[\ln \frac{z}{z_0} + \Psi_m \left(\frac{z}{L} \right) \right] \quad (3.12)$$

Para condições estáveis ($L > 0$) tem-se

$$\Psi_m = \frac{4.7}{L} (z - z_0) \quad (3.13)$$

Para condições neutras ($L = 0$)

$$\Psi_m = 0 \quad (3.14)$$

E para condições instáveis ($L < 0$)

$$\Psi_m = \ln \left[\frac{(\eta_0^2 + 1)(\eta_0 + 1)^2}{(\eta^2 + 1)(\eta + 1)^2} \right] + 2(\tan^{-1} \eta - \tan^{-1} \eta_0) \quad (3.15)$$

onde

$$\eta_0 = \left(1 - 15 \frac{z_0}{L}\right)^{1/4} \quad e \quad \eta = \left(1 - 15 \frac{z}{L}\right)^{1/4} \quad (3.16)$$

A integração de (3.9) não pode ser feita assumindo $u = 0$ em $z = 0$ (inicialmente mais atraente e coerente) porque essa condição de contorno não pode ser satisfeita por uma constante de integração finita.

Para a temperatura na camada superficial, a teoria da similaridade de Monin-Obukhov fornece (Panofsky e Dutton, 1984)

$$\frac{\theta - \theta_0}{T_*} = \frac{1}{k_v} \left[\ln \frac{z}{z_0} - \Psi_h \left(\frac{z}{L} \right) \right] \quad (3.17)$$

sendo

$$T_* = \frac{-H}{\rho C_p u_*} \quad (3.18)$$

A função Ψ_h é dada de acordo com a estabilidade atmosférica.

$$\Psi_h \left(\frac{z}{L} \right) = \begin{cases} 0 & (neutra) \\ 5 \frac{z}{L} & (está vel) \\ 2 \ln \left[\frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - 16 \frac{z}{L}} \right) \right] & (instá vel) \end{cases} \quad (3.19)$$

A determinação do fluxo de calor na superfície do terreno (H) é difícil de ser feita com rigor já que características como o tipo de terreno, rugosidade, composição e umidade afetam o fluxo de calor sensível e latente. Caso se conheça a intensidade de radiação solar, pode-se estimar o fluxo provindo do solo (em condições instáveis) como sendo aproximadamente 90% da intensidade de radiação incidente, como sugerem Bruin e Holtslag (1982). Geralmente a intensidade de radiação solar é conhecida para céu limpo, sem nuvens. Caso tenhamos céu encoberto uma expressão empírica pode ser usada para fazer-se a correção, como feito por Carmichael et al (1986).

$$I = I_c (1 - 0.55 C_N^{1.75}) \quad (3.20)$$

onde C_N é a fração de cobertura de nuvens.

As funções ϕ_m foram propostas para melhor ajustar dezenas de dados obtidos de experimentos realizados por diversos pesquisadores (Bussinger, Dyer, Panofsky, Blackadar, entre outros). É importante salientar que os perfis de velocidade e temperatura dados por (3.12) e (3.17) são bastante realistas apenas para escoamento na camada superficial da atmosfera em terreno aproximadamente plano, suficientemente distante de obstáculos (montanhas, grandes edificações). Nossa intenção na utilização da teoria de Monin-Obukhov para a camada superficial é a de obter melhores subsídios para aplicação de condições de contorno para a solução do problema da dispersão atmosférica, no que se refere à determinação dos campos de velocidade e temperatura.

3.7 - A Rugosidade do Terreno

Já discutimos alguns aspectos da rugosidade do terreno na seção anterior, no que se refere à sua influência sobre a camada superficial e a CLA. As propriedades turbulentas na CLA são afetadas pelo tipo de terreno sobre o qual o escoamento se dá. Terrenos lisos, ou seja, com poucas irregularidades (por exemplo leito de água, areia, neve) geram menos turbulência ao nível

do solo. Já terrenos mais irregulares, ou "rugosos", como plantações, arbustos, árvores altas ou edificações perturbam muito mais o escoamento próximo ao solo, gerando mais turbulência e alterando os padrões de escoamento e transporte de propriedades não só na camada superficial mas em toda a CLA. Cientes da importância de um melhor tratamento das características turbulentas, propomos uma forma de considerar a influência da rugosidade do terreno sobre as propriedades turbulentas do escoamento na CLA, ou seja, como o modelo de turbulência poderá ser alimentado com informações sobre a qualidade da superfície. O objetivo não é o de fechar questão neste aspecto mas apenas introduzir uma possível maneira de incorporar esses efeitos de rugosidade ao modelo de turbulência.

Kobayashi et al (1993) apresenta um estudo dos escoamentos turbulentos sobre florestas e montanhas, baseado no trabalho de Svensson e Häggkvist (1990). A resistência imposta ao escoamento devido à presença de árvores é considerada na equação do movimento através de um termo fonte adicional.

$$S_i = -\rho \alpha C_F \left(\frac{u_j u_j}{2} \right)^{\frac{1}{2}} u_i \quad (3.21)$$

C_F é um coeficiente de arrasto dependente do tipo de vegetação, e α a densidade da área de floresta dada pela razão entre o espaçamento e a altura média das árvores.

O aumento dos níveis de turbulência causado pelas árvores é considerado através de termos fontes adicionais nas equações da energia cinética turbulenta e de sua taxa de dissipação.

$$D_k = \rho \alpha C_F \left(\frac{u_j u_j}{2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.22)$$

$$D_\varepsilon = C_{4\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} \rho \alpha C_F \left(\frac{u_j u_j}{2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.23)$$

Esses novos termos no modelo de turbulência não devem trazer problemas para a solução numérica já que são lineares. O mesmo já não se pode dizer do termo fonte adicional

para a equação do movimento, dado por (3.21), que envolve a raiz quadrada da energia cinética do escoamento médio.

3.8 - Remoção Por Deposição Úmida

Os poluentes são removidos da atmosfera basicamente por um dos dois processos seguintes:

- Deposição úmida
- Deposição seca

Reações químicas são processos que transformam uma espécie em outra e então podem ser considerados como um mecanismo de remoção da espécie reagente.

Nesta seção damos atenção ao processo de remoção por deposição úmida, o qual consiste na absorção dos poluentes pelos hidrometeoros (gotas de chuva) e consequente remoção por precipitação para o solo. Esse processo é também chamado de remoção por lavagem. Neste trabalho tratamos a deposição úmida como um processo irreversível, ou seja, de primeira ordem já que o tratamento de processos reversíveis envolve complexas reações químicas.

3.8.1 - Coeficiente de Deposição Úmida para Gases

A caracterização da remoção úmida faz-se via um coeficiente de lavagem, Λ (s^{-1}), introduzido em um termo fonte negativo ($-\Lambda c$) na equação da concentração (2.46). Este coeficiente depende da taxa de precipitação pluviométrica, p_p (mm / h), e da distribuição dos

tamanhos dos hidrometeoros, $\tilde{N}(\tilde{D}_p)$. Uma distribuição freqüentemente usada é a proposta por Marshall e Palmer (1948).

$$\tilde{N}(\tilde{D}_p) = 0.08 \exp(-41 \tilde{D}_p p_p^{-0.21}) \quad (3.24)$$

para $\tilde{D}_p \geq 0,12$ cm, diâmetro dos hidrometeoros.

O coeficiente de lavagem é dado por (Seinfeld, 1986)

$$\Lambda(\tilde{D}_p) = \pi \tilde{D}_p^2 k_c \tilde{N}(\tilde{D}_p) \quad (3.25)$$

onde k_c é o coeficiente de transferência de massa para o hidrometeoro.

$$k_c = \frac{D}{\tilde{D}_p} \left(2 + 0.6 \text{Re}^{1/2} \text{Sc}^{1/3} \right) \quad (3.26)$$

com

$$\text{Re} = \frac{v_t \tilde{D}_p}{\nu_a} \quad (3.27)$$

$$\text{Sc} = \frac{\nu_a}{D} \quad (3.28)$$

sendo D a difusividade molecular da espécie no ar e v_t a velocidade terminal da gota.

Com o aumento da intensidade da chuva, Λ cresce, como era de se esperar. A tabela 3.6, dá valores de Λ integrados sobre toda a distribuição de diâmetros para algumas taxas de precipitação p_p .

$$\Lambda = \int_0^\infty \Lambda(\tilde{D}_p) d\tilde{D}_p \quad (3.29)$$

Intensidade de Chuva	Tamanho Mínimo dos Hidrometeoros (cm)		
p_p (mm / h)	10-10	0,02	0,12
1	$1,2 \cdot 10^{-4}$	$1,09 \cdot 10^{-4}$	$1,24 \cdot 10^{-5}$
5	$3,01 \cdot 10^{-4}$	$2,89 \cdot 10^{-4}$	$8,08 \cdot 10^{-5}$
15	$5,67 \cdot 10^{-4}$	$5,54 \cdot 10^{-4}$	$2,34 \cdot 10^{-4}$
25	$7,61 \cdot 10^{-4}$	$7,47 \cdot 10^{-4}$	$3,65 \cdot 10^{-4}$

Tabela 3.6 - Coeficiente de lavagem Λ (s^{-1}) para HNO_3 baseado na distribuição dada por (3.24) (Seinfeld, 1986)

Há uma forte dependência de Λ com o limite inferior da distribuição de tamanho (\tilde{D}_p) dos hidrometeoros. A dificuldade de se especificar tal limite é um sério problema na estimativa teórica do coeficiente Λ . O limite mínimo de 0,12 cm exclui um possível grande número de pequenas gotas que poderiam ser responsáveis por uma apreciável fração da remoção úmida. Marshall e Palmer indicaram que a equação (3.24) pode superestimar em até 50% o número de gotas com diâmetro entre 0,02 e 0,12 cm. Portanto o valor real de Λ provavelmente resulta para um limite mínimo de \tilde{D}_p entre esses dois valores.

Devido a essa incerteza sobre o valor de Λ calculado teoricamente, pode ser mais adequado utilizar valores empíricos obtidos de experimentos. Neste sentido o artigo de McMahon e Denison (1978) apresenta uma revisão dos valores reportados na literatura.

3.8.2 - Coeficiente de Deposição Úmida para Particulados

À medida que um hidrometeoro cai ele colide com as partículas de aerossol suspensas no ar e as coleta. A determinação teórica do coeficiente de lavagem Λ para material particulado

envolve então o estudo destas colisões, baseado na distribuição de tamanho das partículas, $N(D_p)$, e dos hidrometeoros $\tilde{N}(\tilde{D}_p)$. Seinfeld (1986) apresenta esse raciocínio chegando a seguinte expressão para o coeficiente de lavagem.

$$\Lambda(D_p) = \int_0^\infty \frac{\pi}{4} \tilde{D}_p^2 v_t(\tilde{D}_p) E(D_p, \tilde{D}_p) \tilde{N}(\tilde{D}_p) d\tilde{D}_p \quad (3.30)$$

A eficiência de colisão, $E(D_p, \tilde{D}_p)$, é a razão entre o número total de colisões entre hidrometeoros e partículas e o número total de partículas numa área igual à da secção transversal do hidrometeoro. Se $E = 1$ então todas as partículas no volume varrido pelo hidrometeoro caindo foram coletadas. Normalmente não se conhece a distribuição dos hidrometeoros, $\tilde{N}(\tilde{D}_p)$. No entanto a taxa de precipitação pluviométrica, p_p (mm / h), pode ser facilmente medida e relacionada com a distribuição de tamanho.

$$p_p = \int_0^\infty \frac{\pi}{6} \tilde{D}_p^3 v_t(\tilde{D}_p) \tilde{N}(\tilde{D}_p) d\tilde{D}_p \quad (3.31)$$

Pode-se então propor uma forma para $\tilde{N}(\tilde{D}_p)$ e determinar seus parâmetros de modo a satisfazer a taxa de precipitação (3.31). Através da equação (3.30) tem-se então o coeficiente de lavagem para partículas de tamanho D_p . O coeficiente global de lavagem será dado por

$$\Lambda = \frac{\int_0^\infty \Lambda(D_p) D_p^3 N(D_p) dD_p}{\int_0^\infty D_p^3 N(D_p) dD_p} \quad (3.32)$$

Apesar do rigorismo seguido na dedução das expressões acima para o coeficiente de lavagem, os resultados obtidos apresentam grandes discrepâncias em relação aos dados experimentais, como discute Schumann (1989). Ele conclui que alguns (desconhecidos) processos que não são levados em conta pela teoria podem ter importantes influências sobre o aerossol, ou em campo certas hipóteses não são encontradas. Permanece de qualquer forma o fato de que os esses modelos teóricos não são capazes de representar corretamente todos os efeitos observados da interação entre os hidrometeoros e as partículas.

Percebe-se então a necessidade de utilizar valores para o coeficiente Λ de remoção úmida de particulados a partir de resultados experimentais. Neste sentido existem inúmeros trabalhos na literatura, dentre eles os de Dongmann et al (1987), Chan e Chung (1986) e de McMahon (1979).

3.9 - Remoção Por Deposição Seca

A deposição seca refere-se à transferência para o solo de substâncias (gases ou particulados) presentes na região de interface da atmosfera com a superfície terrestre (solo, água ou vegetação), quando os consideramos então removidos. O processo de deposição seca compõe-se de três passos.

O primeiro envolve o transporte do material através da camada superficial da atmosfera até a vizinhança da superfície, o qual é controlado pela difusão turbulenta. Esta parte do processo de transporte para o solo é chamada de componente aerodinâmica da deposição.

O segundo passo envolve a difusão do material através da subcamada limite viscosa, adjacente à superfície (alguns milímetros de espessura). Apesar de muito fina, a difusão através dessa camada pode ser criticamente importante na taxa total de deposição. Este passo é chamado de componente superficial da deposição.

O terceiro e último passo, chamado de componente de transferência da deposição, é comandado pela solubilidade ou absorvidade da espécie em relação ao solo e determina quanto do material que se difundiu através da subcamada viscosa é finalmente absorvido (removido) pelo solo.

Como esses mecanismos de transporte são complexos não é usual tentar descrevê-los em seu mais fundamental nível de detalhe mas sim representar o processo de deposição seca em termos de uma velocidade de deposição, v_d , que relaciona o fluxo de uma espécie para o solo com a sua concentração justamente acima da superfície. No nosso caso, como a concentração

está sendo calculada pela equação de concentração, o fluxo pode ser expresso através do gradiente da concentração ao nível do solo.

$$D_t \left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)_{z=0} = v_d c|_{z=0} \quad (3.33)$$

A equação (3.33) nos fornece uma condição de contorno para a equação da concentração na fronteira com o solo. A velocidade de deposição depende da natureza da espécie química considerada, dos parâmetros meteorológicos da camada superficial e da natureza da superfície.

Os três passos do processo de deposição descritos acima podem ser vistos como resistências oferecidas à transferência de material para o solo. Assim temos a resistência aerodinâmica (r_a), a resistência superficial (r_s), e a resistência de transferência (r_t), respectivamente associadas às componentes aerodinâmica, superficial e de transferência que controlam o processo. Sua relação com a velocidade de deposição é

$$v_d = (r_a + r_s + r_t)^{-1} \quad (3.34)$$

No caso de deposição de partículas é necessário alterar a expressão acima por dois motivos. Primeiro, a resistência de transferência (r_t) não existe, pois se considera que uma vez que a partícula encontra a superfície ela é imediatamente depositada. Em segundo lugar, se a partícula tem uma velocidade terminal apreciável, esta contribui para a taxa de deposição. A expressão da velocidade de deposição para partículas é então

$$v_d = (r_a + r_s + r_s r_t v_t)^{-1} + v_t \quad (3.35)$$

A resistência aerodinâmica (r_a) leva em conta a difusão turbulenta na camada superficial e portanto depende da velocidade do vento, estabilidade atmosférica e rugosidade da superfície. Seinfeld (1986) apresenta uma expressão para o caso de estabilidade neutra.

$$r_s(z_1, z_0) = \frac{[\ln(z_1 / z_0)]^2}{k_v^2 u(z_1)} \quad (3.36)$$

A resistência superficial (r_s) depende dos parâmetros de difusão através da subcamada viscosa envolvendo então coeficientes de transporte moleculares, como o número de Schmidt. Como a estrutura e a espessura desta camada são desconhecidos, é necessário fazer uma análise empírica. Seinfeld (1986) propõe uma correlação para a resistência superficial no caso de particulados.

$$r_s = \left(Sc^{-2/3} + 10^{-3/8} \right)^{-1} / u_* \quad (3.37)$$

onde o número de Schmidt é dado por (2.51) e o número de Stokes é dado por

$$S_t = \frac{t_p u_*^2}{\nu} \quad (3.38)$$

O tempo característico da partícula (t_p) é dado por (2.78).

Para gases, Seinfeld (1986) apresenta

$$r_s = \frac{A Sc^{2/3}}{u_*} \quad (3.39)$$

onde A é uma constante e vale aproximadamente 5 para transferência de SO₂ sobre vegetação.

A resistência de transferência (r_t) é a mais difícil de ser quantificada pois é influenciada consideravelmente pela composição química e estrutura física da superfície receptora. A deposição de muitos gases sobre vegetação é essencialmente determinada por fatores biológicos. Também a umidade da superfície influencia a taxa de deposição para quase todos os tipos de poluentes. O'Dell et al (1977) estudou a transferência de massa (gases) para folhas de vegetação e apresenta relações para calcular a resistência de transferência.

Principalmente devido à dificuldade relacionada com a determinação teórica da resistência de transferência, mas também devido às incertezas a respeito de r_a e r_s , os modelos de dispersão atmosférica utilizam valores para a velocidade de deposição obtidos de estudos experimentais de campo. Os valores de v_d para gases como SO_2 , NO_2 e NO são da ordem de 0,1 cm / s. Valores de v_d para gases e partículas encontram-se reportados em vários trabalhos, dentre eles os de McMahon (1979), Müller (1990), Voldner e Sirois (1986) e Wesely (1989).

3.10 - Tratamento das Reações Químicas Importantes

As reações químicas, quando presentes no modelo, estão envolvidas na segunda etapa da solução do problema pois são incluídas no termo fonte R_i da equação de concentração (2.46) .

Inicialmente definimos poluente primário como sendo uma espécie química emitida diretamente pelas fontes ou já existente na atmosfera local, oriunda de outras regiões. Poluente secundário será uma espécie química não emitida pelas fontes, mas que é produto da reação entre outras espécies, sejam estas poluentes primários, secundários ou componentes do ar. Para os poluentes inertes a segunda etapa restringe-se à solução da equação de concentração para aquela espécie. No caso de poluentes inertes primários a solução não depende das concentrações de outros poluentes e pode ser resolvida a qualquer tempo, após a solução do escoamento. A equação da concentração para poluentes inertes secundários deve ser resolvida após a determinação dos campos de concentração dos poluentes primários que os formam. Se houver poluentes (primários ou secundários) que reagem entre si teremos então um acoplamento entre as equações de concentração dos reagentes, que deverão ser resolvidas simultaneamente.

A necessidade de se incluir possíveis reações químicas no modelo de dispersão depende do tempo de transporte da pluma desde a fonte até a saída do domínio. Se este tempo for longo o suficiente para que as reações químicas causem mudanças significativas nas concentrações, então tais reações devem ser consideradas.

Desde que é lançado para a atmosfera o efluente passa a interagir quimicamente com os componentes desta através de complexos mecanismos de reações, que se fossem para ser detalhadamente considerados envolveriam dezenas ou até centenas de reações químicas entre dezenas de espécies. De fato, os modelos de dispersão na meso e macroescala atmosférica procuram dar esse tratamento detalhado aos processos químicos, pois nesses modelos, que envolvem distâncias de centenas ou milhares de quilômetros, a escala de tempo é da ordem de dias ou semanas.

O nosso problema de interesse está contido na microescala e nesta o tempo de transporte da pluma é da ordem de uma hora. Para a maioria dos poluentes industriais, como os oriundos de processos de combustão, tempos desta ordem são pequenos para que os efeitos das reações químicas possam ser significativos. Nestes casos os efeitos de convecção e difusão turbulenta são os que determinam os campos de concentrações. Vejamos por exemplo o caso do SO_2 , um dos grandes poluidores de origem industrial. Medições de campo a partir de centrais termelétricas e indústrias de transformação de minérios revelam taxas de oxidação em plumas variando de 1 a 10% por hora (Seinfeld, 1986). Seria importante então que para tempos superiores a uma hora as reações de oxidação do SO_2 fossem incluídas.

Neste trabalho não incluímos nenhum estudo de caso com reações químicas, devido à dificuldade de obtenção de resultados experimentais para comparação e também pela escassez de tempo. Mesmo assim, a seguir apresentamos o procedimento para a inclusão de reações químicas no modelo, para que se possa notar que não é difícil fazê-lo. Não pretendemos generalizar para permitir a inclusão, no módulo químico, de diversas espécies poluentes já que cada uma apresenta um mecanismo químico diferente. Concentramo-nos, com relação aos processos químicos, nos efluentes industriais oriundos de processos de combustão (ou outros) onde os poluentes mais importantes sejam os óxidos de nitrogênio (NO , NO_2) e o dióxido de enxofre (SO_2).

3.10.1 - Cinética das Reações Químicas

Toda reação química é caracterizada por uma constante de reação, usualmente representada por k , que determina a velocidade da reação. Consideremos uma reação genérica



onde A, B, C, D são espécies e a, b, c, d seus coeficientes na reação.

Da cinética química temos que

$$-\frac{1}{a} \frac{d\chi_A}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d\chi_B}{dt} = \frac{1}{c} \frac{d\chi_C}{dt} = \frac{1}{d} \frac{d\chi_D}{dt} = k \chi_A^{q_A} \chi_B^{q_B} \quad (3.41)$$

onde χ_A , χ_B , χ_C , χ_D são as concentrações molares (ou volumétricas) das espécies, e q_A , q_B são expoentes positivos. A ordem da reação é dada por $q_A + q_B$. Assim, reações de ordem zero tem velocidade constante e independente das concentrações dos reagentes. Nas reações de primeira ordem, normalmente, a velocidade depende só da concentração de um dos reagentes ($q_A=1$ ou $q_B=1$). Em geral as reações químicas na atmosfera são de segunda ordem, com $q_A = q_B = 1$. Desta forma, o termo de reação química nas equações das concentrações das espécies do exemplo acima seriam os seguintes.

$$\begin{aligned} R_A &= -k a \chi_A \chi_B & R_B &= -k b \chi_A \chi_B \\ R_C &= k c \chi_A \chi_B & R_D &= k d \chi_A \chi_B \end{aligned} \quad (3.42)$$

Percebe-se que as equações de concentração dos reagentes resultam acopladas através de seus termos fontes de reação R_i . Se as espécies A e B reagirem também com a espécie E por exemplo, então teremos a equação para E acoplada com as de A e de B. Como uma dada espécie i pode ser reagente numa reação e produto em outra, o seu termo fonte de reação na forma geral é

$$R_i = R_R \chi_i + R_P \quad (3.43)$$

O coeficiente R_R envolve uma soma de termos do tipo R_A / χ_A (ver equação 3.42) provindos das reações onde a espécie i é reagente. O coeficiente R_P envolve uma soma de termos do tipo de R_C ou R_D (ver equação 3.42) provindo de reações onde a espécie i é um produto.

A solução numérica das equações de concentração acopladas é feita segregadamente, ou seja, são resolvidas separadamente, em sequência, de forma iterativa até a convergência. Assim, seus termos fontes são lineares, pois temos a partir de (3.43)

$$R_i + S_i = R_R \chi_i + R_P - \Lambda c_i \quad (3.44)$$

O termo $S_i = - \Lambda c_i$ representa a remoção por deposição úmida, discutido na seção 3.8 . A concentração molar (volumétrica) relaciona-se com a concentração mássica através da relação

$$c_i = \chi_i \frac{M_i}{M_{ar}} \quad (3.45)$$

Então, substituindo (3.45) em (3.44) temos o termo fonte geral para a equação da concentração

$$R_i + S_i = \left(R_R \frac{M_{ar}}{M_i} - \rho \Lambda \right) c_i + R_P \quad (3.46)$$

É interessante, ao final deste capítulo, fazer um resumo acerca de como cada fenômeno atmosférico importante para a previsão da dispersão de plumas é incluído no modelo. A estabilidade atmosférica (mormente o comprimento de Monin-Obukhov), o perfil de velocidade na CLA e a remoção seca de poluentes são considerados através das condições de contorno. A altura da CLA é a própria altura do domínio de cálculo. A remoção úmida e as reações químicas são consideradas através de termos fontes na equação da concentração. A rugosidade do terreno é considerada através da condição de contorno no solo e também através de termos fontes nas equações do movimento e das variáveis turbulentas. A presença de material particulado é considerada através da velocidade terminal no termo convectivo da equação da concentração.

Cabe aqui colocarmos que devido à dificuldade na obtenção de resultados experimentais para comparação e também à limitação no tempo para concluir esse trabalho, não estudamos casos envolvendo particulados, remoção seca ou úmida e reações químicas. Decidimos, no entanto, apresentar a formulação do modelo de forma completa, mostrando como todos os principais fenômenos que acontecem na CLA, e que influem na dispersão de poluentes, podem ser considerados.

CAPÍTULO QUATRO

METODOLOGIA DE SOLUÇÃO

Neste capítulo apresentamos a metodologia numérica utilizada para resolver o sistema de equações diferenciais governantes do modelo de escoamento e dispersão na CLA. Relembrando (capítulo 2), temos para o cálculo do escoamento um conjunto de cinco equações (sendo uma vetorial) de conservação: massa, quantidade de movimento, energia, energia cinética turbulenta e dissipação da energia cinética turbulenta. Assim, no problema tridimensional, são ao todo sete equações diferenciais acopladas. Para o cálculo da dispersão temos, em geral, tantas equações (de concentração) quantas forem as espécies consideradas. Note que os campos de concentração só serão idênticos, sendo portanto necessário resolver somente uma equação, caso as condições de contorno e termos fontes das equações (e velocidade terminal no caso de particulados) das espécies sejam os mesmos.

4.1 - Características Gerais

O método utilizado é o dos volumes finitos em coordenadas curvilíneas generalizadas (*body fitted coordinates*), que vem sendo largamente empregado no SINMEC¹. No método dos volumes finitos a equação de conservação de uma variável qualquer (ϕ), escrita na sua forma conservativa, é integrada no espaço e no tempo em cada volume elementar em que é discretizado o domínio. Uma vez integrada, a equação apresenta-se na sua forma integral e os fluxos através das faces são aproximados diretamente. Deste processo resulta um sistema formado de tantas equações algébricas quanto for o número de volumes elementares. A solução deste sistema de equações fornece uma solução numérica para a equação de transporte. Se a equação for não linear é necessário repetir o processo iterativamente até a convergência. Quando se tem um sistema de equações diferenciais a resolver (como no nosso caso), repete-se esse processo para todas as equações, de forma iterativa até a convergência.

O problema é resolvido em suas variáveis primitivas, ou seja, as próprias variáveis das equações governantes (velocidade, pressão, temperatura potencial e concentração). Dessa forma, mantém-se a imediata interpretação física e a generalidade, características da modelagem matemática, tal como foi feita. Ainda mais, a aplicação de condições de contorno é menos complexa.

A adoção do sistema de coordenadas curvilíneas generalizadas permite que a topografia do terreno seja mais facilmente representada. Isso não ocorre, por exemplo, quando se utiliza coordenadas cartesianas, com as quais é difícil representar corretamente as irregularidades de uma topografia complexa, a menos que se use uma malha muito refinada. Em problemas tridimensionais malhas muito refinadas demandam elevadíssima capacidade computacional tanto em termos de memória quanto em velocidade de processamento. Neste sentido, a adoção de um

¹ Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor - Departamento de Engenharia Mecânica - UFSC, onde se realiza este trabalho.

sistema de coordenadas generalizadas permite uma melhor representação do terreno com malhas menos refinadas, quando comparadas com o emprego de malhas cartesianas.

As demais características da metodologia numérica empregada são o arranjo colocalizado de variáveis, a solução segregada (não simultânea) do sistema de equações, esquema de interpolação de alta ordem (QUICK) para os termos convectivos, método SIMPLEC para o acoplamento pressão-velocidade, formulação totalmente implícita no tempo, emprego de volumes fictícios para aplicação das condições de contorno, utilização do método ADI (TDMA linha a linha) para a solução dos sistemas de equações algébricas (exceto para a equação da conservação da massa onde foi adotado o GMRES). Essas características do método serão expostas nas seções que seguem.

4.2 - Transformação de Coordenadas

O emprego de um sistema de coordenadas curvilíneas para a solução das equações requer que as mesmas sejam rescritas nesse novo sistema coordenado, já que elas foram apresentadas no sistema cartesiano. Através dessa transformação de coordenadas podemos imaginar que o problema é levado do domínio físico real (que pode ser irregular e arbitrário) para o domínio computacional (ou espaço transformado), que é prismático e regular (figura 4.1).

A malha empregada na discretização do domínio físico é estruturada. As equações governantes - que foram apresentadas no capítulo 2 no sistema de coordenadas cartesianas (x_i) - são transformadas para o sistema de coordenadas do espaço transformado (ξ_i), sendo que as variáveis dependentes no espaço físico são mantidas como variáveis dependentes no espaço transformado. As equações governantes podem ser escritas de uma forma geral como

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + S \quad (4.1)$$

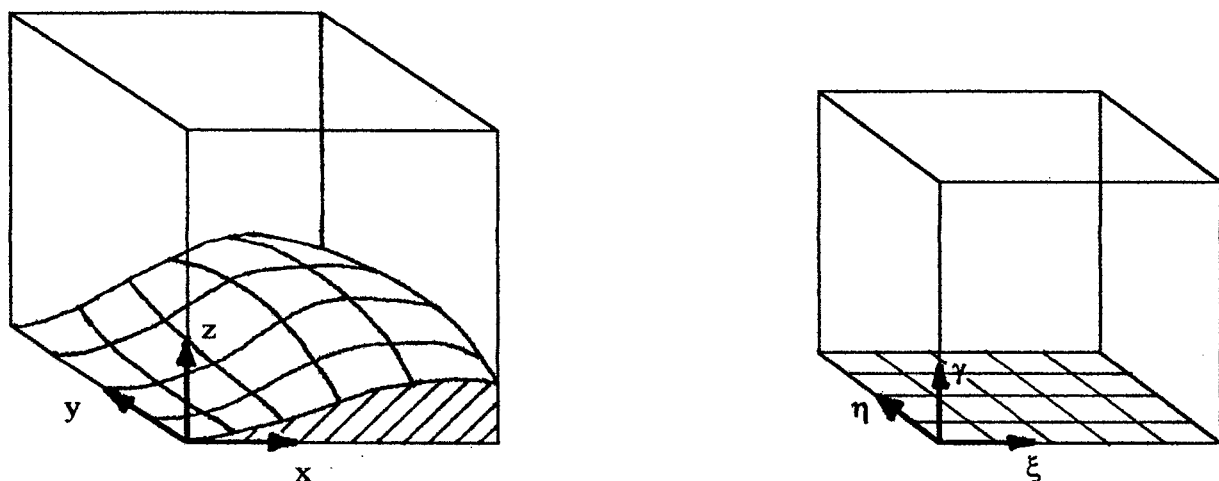


Figura 4.1 - Domínio físico (esq.) e domínio computacional (dir.)

Os parâmetros na equação acima são dados na tabela 4.1. Γ_{ij} é o tensor dos coeficientes de transporte difusivo, que no nosso caso é um tensor diagonal.

$$\Gamma_{ij} = \begin{bmatrix} \Gamma_x & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma_y & 0 \\ 0 & 0 & \Gamma_z \end{bmatrix} = \Gamma_{x_i} \delta_{ij} \quad (4.2)$$

Em vista desta particularidade, a equação (4.1) pode ser escrita como

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_{x_i} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + S \quad (4.3)$$

Os coeficientes de transporte moleculares são desprezados porque em comparação com os coeficientes de transporte turbulentos os primeiros são várias ordens de magnitude menores (duas ordens de grandeza inferiores no caso de escoamento em túnel de vento e cinco ordens de grandeza no escoamento atmosférico).

Equação	ϕ	Γ_x	Γ_y	Γ_z	S
Continuidade	1	0	0	0	0
Navier-Stokes	u_i	ρK_x^m	ρK_y^m	ρK_z^m	$-\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\Gamma_{x_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \right] - \tilde{\rho} g \delta_{i3} + F_i$
Energia	θ	$\frac{\rho K_x^m}{Pr_t}$	$\frac{\rho K_y^m}{Pr_t}$	ρK_z^h	0
Energia Cinética Turbulenta	k	$\rho \frac{K_x^m}{\sigma_k}$	$\rho \frac{K_y^m}{\sigma_k}$	$\rho \frac{K_z^m}{\sigma_k}$	$P + G - \rho \varepsilon$
Dissipação da Energia Cinética Turbulenta	ε	$\rho \frac{K_x^m}{\sigma_\varepsilon}$	$\rho \frac{K_y^m}{\sigma_\varepsilon}$	$\rho \frac{K_z^m}{\sigma_\varepsilon}$	$[C_{1\varepsilon}(P + G) - C_{2\varepsilon} \rho \varepsilon] \frac{\varepsilon}{k}$
Concentração	c	$\frac{\rho K_x^m}{Sc_t}$	$\frac{\rho K_y^m}{Sc_t}$	ρK_z^h	$-\rho \Lambda c + R$

Tabela 4.1- Parâmetros das equações governantes

Convém comentar que devido ao fato de haver coeficientes de transporte difusivo diferentes nas direções horizontal e vertical, o tensor de Reynolds, definido pela equação (4.4), não será simétrico ($\tau_{ij} \neq \tau_{ji}$).

$$\tau_{ij} = \Gamma_{x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.4)$$

A equação genérica de transporte (4.1) transformada para o sistema curvilíneo de coordenadas (através da regra da cadeia) torna-se ²

$$\frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial \xi_j} (\rho U_j \phi) = \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(\frac{\hat{\Gamma}_{ij}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \xi_j} \right) + \hat{S} \quad (4.5)$$

onde J é o jacobiano da transformação dado por ³

$$J = (\det[a_{ij}])^{-1} \quad (4.6)$$

com

$$a_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial \xi_j} \quad (4.7)$$

Como o problema é resolvido empregando-se uma malha para discretizar o domínio, as métricas da transformação de coordenadas são calculadas numericamente. O que se obtém diretamente da malha são as aproximações numéricas para os termos do tipo $\frac{\partial x_i}{\partial \xi_j}$. As métricas inversas, necessárias na equação transformada, são dadas por

$$\frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} = J \text{ cof}(a_{ji}) \quad (4.8)$$

Para simplificar a notação, adotaremos a seguinte definição com relação às métricas.

² o acento circunflexo (^) denota termos escritos no sistema transformado de coordenadas (ξ_i)

³ det significa determinante

$$b_{ij} = \text{cof}(a_{ji}) = \frac{1}{J} \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \quad (4.9)$$

O tensor dos coeficientes de transporte difusivo (turbulento) transforma-se de acordo com

$$\hat{\Gamma}_{ij} = \frac{\partial \xi_i}{\partial x_k} \frac{\partial \xi_j}{\partial x_l} \Gamma_{kl} = \frac{\partial \xi_i}{\partial x_k} \frac{\partial \xi_j}{\partial x_k} \Gamma_{x_k} \quad (4.10)$$

As componentes contravariantes da velocidade (sem normalização métrica e que fisicamente representam fluxos volumétricos) são dadas por

$$U_i = \frac{1}{J} \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} u_j = b_{ij} u_j \quad (4.11)$$

Os termos fontes (S) são transformados empregando-se, basicamente, a regra da cadeia. O termo do gradiente de pressão da equação para u_i , por exemplo, após transformado torna-se

$$\hat{P}^{u_i} = \frac{1}{J} \frac{\partial p}{\partial \xi_j} \frac{\partial \xi_j}{\partial x_i} = b_{ji} \frac{\partial p}{\partial \xi_j} \quad (4.12)$$

Transformações semelhantes são feitas para as demais parcelas de S da equação de Navier-Stokes. Na transformação de termos fontes escalares, esses são apenas divididos pelo jacobiano. Assim os termos fontes transformados das equações do movimento resultam

$$\hat{S}^{u_i} = -\frac{\partial p}{\partial \xi_j} b_{ji} + \frac{\partial}{\partial \xi_j} \left[b_{ki} \Gamma_{x_j} \frac{\partial (J U_j)}{\partial \xi_k} \right] - \frac{\tilde{\rho} g \delta_{i3}}{J} + \frac{F_i}{J} \quad (4.13)$$

Os termos fontes transformados para as equações do modelo de turbulência são

$$\hat{S}^k = \hat{P} + \hat{G} - \frac{\rho \varepsilon}{J} \quad (4.14)$$

$$\hat{S}^\varepsilon = \left[C_{1\varepsilon} (\hat{P} + \hat{G}) - C_{2\varepsilon} \frac{\rho \varepsilon}{J} \right] \frac{\varepsilon}{k} \quad (4.15)$$

sendo

$$\begin{aligned} \hat{P} = J \left\{ 2 \left[\left(\Gamma_x b_{j1} \frac{\partial u}{\partial \xi_j} \right)^2 + \left(\Gamma_y b_{j2} \frac{\partial v}{\partial \xi_j} \right)^2 + \left(\Gamma_z b_{j3} \frac{\partial w}{\partial \xi_j} \right)^2 \right] + \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} (\Gamma_y u b_{j2} + \Gamma_x v b_{j1}) \right]^2 + \right. \\ \left. \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} (\Gamma_z u b_{j3} + \Gamma_x w b_{j1}) \right]^2 + \left[\frac{\partial}{\partial \xi_j} (\Gamma_z v b_{j3} + \Gamma_y w b_{j2}) \right]^2 \right\} \end{aligned} \quad (4.16)$$

$$\hat{G} = -\rho g \beta K_z^h b_{j3} \frac{\partial \theta}{\partial \xi_j} \quad (4.17)$$

Ainda no modelo de turbulência, os termos G_M e G_H , definidos por (2.72) e (2.73), após transformados resultam

$$\hat{G}_M = \left(J b_{j3} \frac{k}{\varepsilon} \right)^2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial \xi_j} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial \xi_j} \right)^2 \right] \quad (4.18)$$

$$\hat{G}_H = g \beta \left(\frac{k}{\varepsilon} \right)^2 J b_{j3} \frac{\partial \theta}{\partial \xi_j} \quad (4.19)$$

O termo fonte da equação de concentração, por ser escalar, é simplesmente dividido pelo jacobiano.

$$\hat{S}^{c_i} = \frac{1}{J} (-\Lambda c_i + R_i) \quad (4.20)$$

4.3 - Integração da Equação de Transporte de um Escalar

O método dos volumes finitos baseia-se na técnica de aplicar os princípios de conservação das propriedades de forma discreta a cada volume elementar em que o domínio de cálculo é subdividido. Isto pode ser feito realizando-se os balanços da propriedade ou integrando-se a forma conservativa das equações sobre esses volumes. Como já enfatizado, em nosso procedimento usamos coordenadas curvilíneas generalizadas e integramos a equação genérica transformada de conservação (4.5) sobre o volume elementar do espaço transformado (figura 4.2). A integração sobre volumes no espaço transformado (cubos regulares) é muito mais simples do que seria no espaço físico, de geometria irregular muito mais complexa. As informações sobre as reais dimensões e forma do volume são consideradas através das métricas e do jacobiano da transformação de coordenadas.

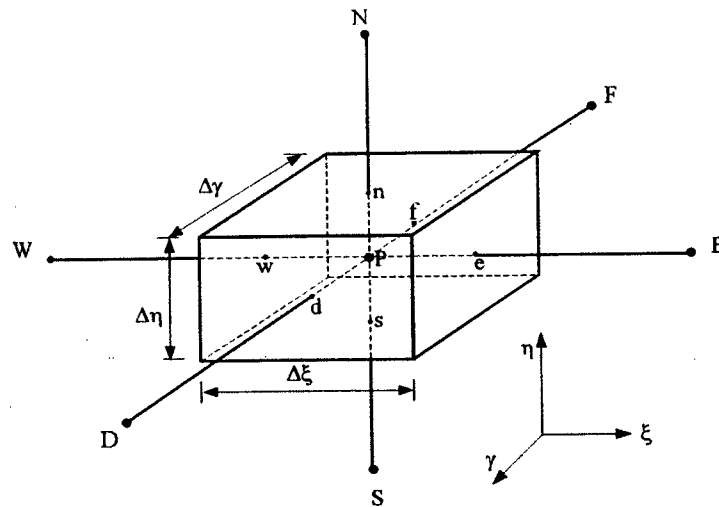


Figura 4.2 - Volume de controle elementar (de Maliska, 1995, fig. 15.1)

Integrando-se (4.5) sobre o volume de controle elementar de dimensões $\Delta\xi \times \Delta\eta \times \Delta\gamma$ (figura 4.2) no espaço e no tempo, obtém-se

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_f^d \int_s^n \int_w^e \left[\frac{1}{J} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \xi_i} (\rho u_i \phi) \right] d\xi d\eta d\gamma = \int_t^{t+\Delta t} \int_f^d \int_s^n \int_w^e \left[\frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(\frac{\hat{\Gamma}_{ij}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \xi_j} \right) + \hat{S} \right] d\xi d\eta d\gamma \quad (4.21)$$

Todos os termos são avaliados no novo instante de tempo $t + \Delta t$, usando derivada para trás para avaliar a variação temporal. Isto caracteriza a formulação totalmente implícita, na qual o valor de ϕ_P no novo instante de tempo depende dos valores de ϕ nos pontos vizinhos também no novo instante de tempo, os quais não são ainda conhecidos. Assim, a formulação implícita requer a solução de um sistema de equações, mas apresenta a vantagem de não impor restrições (severas) ao passo de tempo de avanço da solução. Na formulação explícita o valor de ϕ_P no novo instante de tempo depende dos valores de ϕ nos pontos vizinhos no instante de tempo anterior, os quais já são conhecidos e portanto não há um sistema acoplado de equações algébricas para ser resolvido (o que é uma vantagem em relação à formulação implícita). No entanto, o passo de tempo é limitado (e geralmente muito pequeno), o que torna a formulação explícita muito lenta (no sentido de avanço no tempo), inviabilizando o seu emprego.

Tomando $\Delta\xi = \Delta\eta = \Delta\gamma = 1$ a integração (4.21) resulta em

$$\begin{aligned} & \frac{(\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0)}{J_P \Delta t} + (\rho U \phi)_e - (\rho U \phi)_w + (\rho V \phi)_n - (\rho V \phi)_s + (\rho W \phi)_d - (\rho W \phi)_f = \\ & \left(\frac{\hat{\Gamma}_{11}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \frac{\hat{\Gamma}_{12}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + \frac{\hat{\Gamma}_{13}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \gamma} \right)_e - \left(\frac{\hat{\Gamma}_{11}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \frac{\hat{\Gamma}_{12}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + \frac{\hat{\Gamma}_{13}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \gamma} \right)_w + \\ & \left(\frac{\hat{\Gamma}_{21}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \frac{\hat{\Gamma}_{22}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + \frac{\hat{\Gamma}_{23}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \gamma} \right)_n - \left(\frac{\hat{\Gamma}_{21}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \frac{\hat{\Gamma}_{22}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + \frac{\hat{\Gamma}_{23}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \gamma} \right)_s + \\ & \left(\frac{\hat{\Gamma}_{31}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \frac{\hat{\Gamma}_{32}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + \frac{\hat{\Gamma}_{33}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \gamma} \right)_d - \left(\frac{\hat{\Gamma}_{31}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \frac{\hat{\Gamma}_{32}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + \frac{\hat{\Gamma}_{33}}{J} \frac{\partial \phi}{\partial \gamma} \right)_f + L[\hat{S}] \end{aligned} \quad (4.22)$$

L é o operador que lineariza o termo fonte. Uma vez linearizado, o termo fonte é escrito na forma

$$S = S_q \phi + S_c \quad (4.23)$$

Falaremos sobre o tratamento de termos fontes não lineares mais adiante numa seção própria.

É necessário agora avaliar os valores de ϕ e suas derivadas nas faces do volumes de controle em função de seus valores nodais (nos centros dos volumes) para que os fluxos sejam determinados. Para tal são usados esquemas de interpolação (ou função de interpolação). Quanto melhor for a avaliação dos fluxos nas faces, tanto melhor será a precisão da solução numérica. Uma boa função de interpolação é aquela que está o mais próxima possível da equação que queremos resolver (Maliska, 1995). Na próxima seção são apresentados os esquemas de interpolação adotados.

4.4 - Esquemas de Interpolação

4.4.1 - O Esquema WUDS

Inicialmente o esquema de interpolação adotado para todas as equações foi o WUDS - *Upstream-Weighted Differencing Schemes* - (Raithby e Torrance, 1974). Este esquema baseia-se na solução de um problema convectivo-difusivo unidimensional (em regime permanente e sem termos fontes). Os valores de ϕ e sua derivada na face do volume de controle são dados em função dos valores nodais adjacentes. Por exemplo, para a face leste (e) tem-se

$$\phi_e = \left(\frac{1}{2} + \alpha_e\right) \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_e\right) \phi_E \quad (4.24)$$

$$\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \Big|_e = \beta_e \Gamma_e (\phi_E - \phi_P) \quad (4.25)$$

onde α_e e β_e são funções do número de Peclet da malha, que é uma razão entre o transporte convectivo e o difuso. Para a face leste, por exemplo, temos

$$Pe = \frac{J \rho U}{\left[\hat{\Gamma}_{ij} \right]_e} \quad (4.26)$$

onde $\left[\hat{\Gamma}_{ij} \right]$ é o elemento i, j do tensor $\hat{\Gamma}_{ij}$.

Este esquema contempla os termos convectivos e difusivos da equação de transporte. No problema puramente convectivo ($Pe = \infty$) $\alpha_e = 1/2$ (ou $-1/2$ de acordo com o sinal da velocidade) e $\beta_e = 0$, e o esquema torna-se *upwind* puro (aproximação de primeira ordem). No problema puramente difusivo ($Pe = 0$) $\alpha_e = 0$ e $\beta_e = 1$, e o esquema transforma-se em diferenças centrais (aproximação de segunda ordem). Embora seja um esquema híbrido, o WUDS é geralmente considerado como um esquema de primeira ordem. Isto deve-se ao fato de que normalmente o número de Peclet da malha é alto o suficiente para que o esquema tenda a ser *upwind* puro.

O WUDS envolve um ponto a montante ou um a jusante (conforme a orientação da velocidade) do ponto P (centro do volume considerado na integração). Desta forma, temos um estêncil de três pontos em cada direção (W, P e E). No problema tridimensional (em malha cartesiana) resulta que cada ponto P se relaciona com seus 6 vizinhos imediatos, com os quais compartilha faces comuns (E, W, N, S, D, F).

Com a intenção de melhorar a qualidade da solução, diminuindo os efeitos da difusão numérica inerentes a esquemas de primeira ordem, buscamos a utilização de esquemas de interpolação de mais alta ordem, como o exposto na próxima seção. Uma detalhada discussão a respeito da difusão numérica é dada por Maliska (1995).

4.4.2 - O Esquema QUICK

Apresentado por Leonard (1979), no esquema QUICK o valor de ϕ na face do volume é estimado através de uma interpolação quadrática envolvendo dois pontos nodais a montante do escoamento e um a jusante, na direção considerada. Assim, para a face leste temos (supondo $U > 0$)

$$\phi_e = \frac{3}{4}\phi_P + \frac{3}{8}\phi_E - \frac{1}{8}\phi_W \quad (4.27)$$

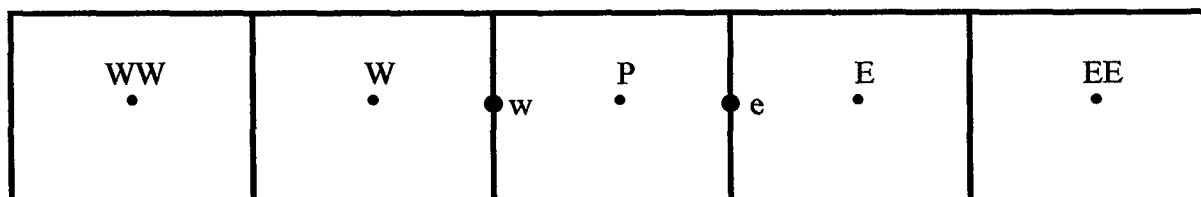


Figura 4.3 - Pontos envolvidos no esquema QUICK

O QUICK produz uma aproximação de terceira ordem para os termos convectivos em malha cartesiana uniforme. Este esquema envolve dois pontos a montante e dois a jusante do volume considerado, constituindo, portanto, um estêncil de cinco pontos em cada direção. No problema tridimensional isto significaria que cada volume P pode se relacionar com até 12 vizinhos (EE, E, W, WW, NN, N, S, SS, DD, D, F, FF). De fato, em geral, cada ponto se relaciona (devido somente a interpolação dos termos convectivos pelo QUICK) com 9 vizinhos.

A ordem de aproximação dos esquemas de interpolação é facilmente determinada (usando-se expansão em série de Taylor) no caso de malhas cartesianas uniformes. Quando se trata de malhas não uniformes (cartesianas não igualmente espaçadas ou então malhas curvilíneas generalizadas), há controvérsias com relação à manutenção ou não da ordem de aproximação. Thompson e Mastin (1985) mostram que, ao contrário do que popularmente se acredita, a ordem em malha uniforme pode ser formalmente preservada numa malha não uniforme. Isto porque a

discretização é, matematicamente, um mapeamento entre os pontos coordenados da malha e os inteiros positivos (os índices dos pontos da malha), que são, obviamente, igualmente espaçados.

A forma conservativa dos termos convectivos mapea-se de acordo com

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j \phi) \rightarrow J \frac{\partial}{\partial \xi_j} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi_j}{\partial x_k} \rho U_k \phi \right) \quad (4.28)$$

Desta maneira, uma vez que as métricas da transformação de coordenadas sejam incluídas com ordem de aproximação comparável, a ordem matemática formal do esquema de interpolação pode ser mantido.

Até aqui temos discutido a aproximação dos termos convectivos pelo esquema QUICK. Os termos difusivos são aproximados por diferenças centrais (segunda ordem). Por exemplo, a derivada de ϕ na face leste é calculada por

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_e = \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta \xi} = \phi_E - \phi_P \quad (4.29)$$

Derivadas cruzadas (devido a não ortogonalidade da malha) são também aproximadas por diferenças centrais. Por exemplo:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_e = \frac{\frac{\phi_N + \phi_{NE}}{2} - \frac{\phi_S + \phi_{SE}}{2}}{2\Delta \eta} = \frac{\phi_N + \phi_{NE} - \phi_S - \phi_{SE}}{4} \quad (4.30)$$

Por ser um esquema de alta ordem, o QUICK (associado com diferenças centrais para os termos difusivos) muitas vezes acarreta maior dificuldade de convergência do que o WUDS. Esse problema de convergência é mais acentuado no caso das equações do modelo de turbulência. Por isso, optamos por adotar o QUICK para as equações do movimento, da energia e da concentração, enquanto que o WUDS foi mantido para as equações da energia cinética turbulenta e da sua taxa de dissipação.

A manutenção de um esquema de primeira ordem para as quantidades turbulentas, para o nosso tipo de escoamento, não implica numa perda da qualidade da solução. Esta nossa afirmação baseia-se nas conclusões do trabalho de Lien e Leschziner (1994), que estudaram a influência da adoção de três combinações diferentes de esquemas de interpolação para os termos convectivos na solução do escoamento turbulento sobre um degrau. Na primeira combinação foi usado o esquema UDS (*upwind differencig scheme*) para os termos convectivos, tanto para as equações do movimento como para as da turbulência. Esta combinação foi denominada UDS+UDS. Na segunda combinação foi adotado o QUICK para as equações do movimento e o UDS para a turbulência (combinação QUICK+UDS). A terceira combinação consistiu do QUICK para as equações do movimento e o UMIST para as quantidades turbulentas (combinação QUICK+UMIST). O esquema UMIST (*upstream monotonic interpolation for scalar transport*, Lien e Leschziner, 1994) é uma variante do esquema QUICK, no qual um limitador é introduzido para evitar oscilações. Na análise dos resultados produzidos (comprimento da recirculação, perfis de velocidade e de tensão cizalhante), constatou-se que as diferenças entre as combinações UDS+UDS e QUICK+UMIST foram significativas. Já entre as combinações QUICK+UMIST e QUICK+UDS as diferenças foram muito pequenas. A explicação é a de que a contribuição dos termos convectivos na equação de transporte das quantidades turbulentas é pequena, portanto a sua aproximação por um esquema de alta ordem (UMIST) não resultou em diferenças quando comparado com uma aproximação de primeira ordem (UDS). De fato, as equações de k e ϵ são dominadas pelos termos de produção e destruição.

4.5 - O Conjunto de Equações Discretizadas

Uma vez avaliados os valores de ϕ nas faces, os fluxos convectivos são prontamente obtidos. Considerando a face leste novamente, o fluxo convectivo de ϕ será

$$\dot{M}_e \phi_e = (\rho U)_e \phi_e \quad (4.31)$$

já que as velocidades contravariantes (que representam fluxo volumétrico) são calculadas na faces dos volumes.

Uma vez avaliados os fluxos convectivos e difusivos através das faces do volume elementar (utilizando-se as funções de interpolação discutidas na seção anterior), a equação integrada (4.22) é rescrita, agora substituindo-se os fluxos em função dos valores nodais de ϕ (do volume P e dos vizinhos envolvidos nos esquemas de interpolação).

$$A_P^\phi \phi_P + \sum_{NB} A_{NB}^\phi \phi_{NB} = B_P^\phi \quad (4.32)$$

onde NB (*neighbour*) será cada um dos volumes vizinhos envolvidos na determinação dos fluxos.

Quando o esquema WUDS é adotado para aproximar os fluxos convectivos e difusivos (e diferenças centrais para os termos difusivos cruzados), a equação discretizada de conservação para o volume P envolve os valores de ϕ em 18 volumes vizinhos E, W, N, S, D, F, NE, SE, NW, SW, DE, FE, DW, FW, DN, DS, FN, FS, além do próprio P, num total de dezenove pontos. Note que se a malha for ortogonal aparecem apenas os pontos P, E, W, N, S, D, F (sete pontos), já que os termos contendo derivadas cruzadas (equação 4.30) serão nulos, pois teremos $\hat{\Gamma}_{ij} = 0$ para $i \neq j$.

Quando o esquema QUICK é usado para aproximar os termos convectivos e diferenças centrais para os termos difusivos, a equação discretizada para o ponto P envolve, além dos 18 vizinhos acima mencionados (para o WUDS), mais 6 pontos, quais sejam: EE, WW, NN, SS, DD, FF). Como o código já havia sido escrito para o esquema WUDS (19 pontos) decidimos passar os termos envolvendo esses 6 pontos extras exigidos pelo QUICK para o termo fonte, de maneira semelhante ao que foi feito por Lien e Leschziner (1994) para o esquema UMIST, que como já mencionamos na seção anterior, é um QUICK com limitadores.

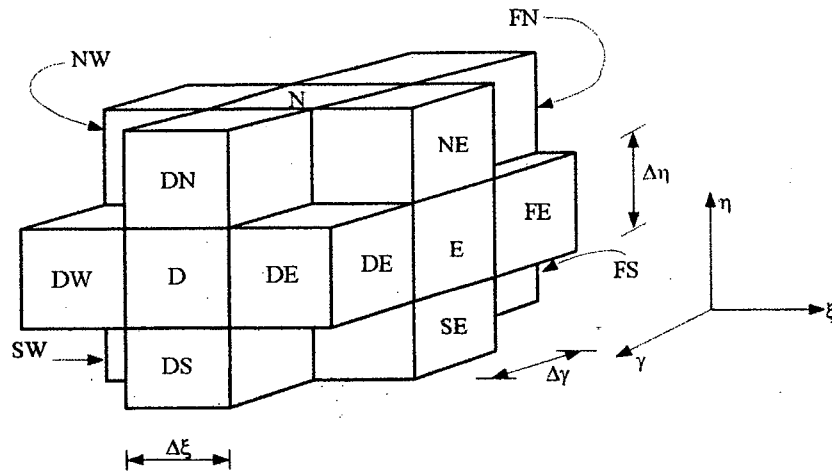


Figura 4.4 - Volume de controle elementar e seus 18 vizinhos (de Maliska, 1995, fig. 15.2)

O conjunto de equações algébricas resultantes da discretização das equações integradas em cada volume elementar constitui um sistema de equações lineares (termos não lineares são previamente linearizados). Cada equação do sistema tem a forma da equação (4.32). Os coeficientes A_p e A_{nb} refletem a interação entre os volumes vizinhos, através dos processos convectivos e difusivos de transporte.

4.6 - Arranjo das Variáveis na Malha

O arranjo colocalizado de variáveis é empregado, no qual os volumes de controle para todas as variáveis são coincidentes. As vantagens do arranjo colocalizado sobre o descontraído, para problemas tridimensionais, deve-se ao fato de apenas um único volume de controle ser necessário, fazendo com que:

- Os fluxos de massa sejam para 6 faces, contra 24 faces no caso em que as variáveis sejam descontraídas;

- A quantidade de informações geométricas necessárias da malha seja bem menor;
- Os coeficientes das três equações das componentes da velocidade sejam idênticos.

Esses fatores trazem uma economia de memória computacional significativa além de simplificar muito a implementação do código. Durante um longo tempo (sendo ainda atualmente usado) o arranjo desencontrado foi supostamente empregado para evitar oscilações no campo de pressões. O arranjo colocalizado ressurgiu a partir da metodologia apresentada por Peric et al (1988), para escoamentos incompressíveis. Maliska et al (1990) apresenta uma extensão do método para escoamentos a qualquer regime de velocidade em coordenadas curvilíneas generalizadas, o qual é empregado neste trabalho.

4.7 - O Acoplamento Pressão-Velocidade

Nosso objetivo nesta seção é apenas o de expor brevemente o método usado para tratar o acoplamento pressão-velocidade. Detalhes a respeito desse problema são discutidos por inúmeros autores, como por exemplo Maliska (1995), cap. 7. O escoamento na CLA pode, sem dúvida, ser considerado como incompressível, já que as velocidades envolvidas são muito baixas (comparadas com a velocidade sônica), resultando portanto em pequenas variações no campo de pressão. A massa específica pode ser considerada como uma função apenas da temperatura. Desta forma, um método de tratamento do acoplamento pressão-velocidade para escoamentos incompressíveis é apropriado.

Na solução segregada do sistema de equações governantes, cada equação é utilizada para o avanço de uma variável. As equações do movimento, da energia e do modelo de turbulência são empregadas, respectivamente, para o avanço das componentes cartesianas da velocidade, da temperatura potencial e das quantidades turbulentas. A equação restante, conservação da massa, deve então ser usada para avançar a solução do campo de pressão. Como a pressão não aparece na equação da continuidade, um artifício é adotado para que a mesma possa ser empregada para

o avanço da pressão. Esse artifício denomina-se método de tratamento do acoplamento pressão-velocidade. Genericamente, as componentes da velocidade (cartesianas ou contravariantes) e a pressão são atualizadas, de uma iteração para a próxima, através de uma correção dada por ⁴

$$\phi = \phi^* + \phi' \quad (4.33)$$

onde ϕ^* é o valor de ϕ da última iteração e ϕ' é a correção.

O método SIMPLEC (Van Doormal e Raithby, 1984) foi originalmente proposto para arranjo desencontrado de variáveis. No entanto o mesmo pode ser utilizado também quando se tem arranjo colocalizado. As equações de correção (avanço) das velocidades contravariantes são do tipo (para a velocidade U na face leste)

$$U_e = U_e^* - d_e b_{11}|_e (P'_E - P'_P) \quad (4.34)$$

onde

$$d_e = \frac{d_P + d_E}{2} \quad (4.35)$$

e

$$d_P = \frac{1}{A_P^u - \sum A_{NB}^u} \quad (4.36)$$

A equação de conservação da massa discretizada para o volume de controle P é

⁴ O superescrito “linha” (') aqui não significa flutuação turbulenta mas sim um termo de correção

$$\frac{M_p - M_p^0}{\Delta t} + \dot{M}_e - \dot{M}_w + \dot{M}_n - \dot{M}_s + \dot{M}_d - \dot{M}_f = 0 \quad (4.37)$$

onde os fluxos de massa são dados por expressões do tipo (novamente para a face leste)

$$\dot{M}_e = (\rho U)_e \quad (4.38)$$

Substituindo as equações de correção das velocidades, do tipo de (4.34), na equação de conservação da massa (4.37) resulta uma equação (tipo de Poisson) para a correção da pressão.

$$A_p P'_p + \sum_{NB} A_{NB} P'_{NB} = B_p \quad (4.39)$$

O termo fonte representa o “desbalanço” na conservação da massa. Grosseiramente falando (mas didaticamente elucidativo), quando há um grande fluxo líquido de massa entrando num volume, P' é grande e tende a empurrar o fluido para fora daquele volume. No avanço do processo iterativo de solução, quando o campo de velocidades resultante da solução das equações do movimento satisfizer a conservação da massa, o termo B será zero e consequentemente a solução de (4.39) resultará um campo de P' identicamente nulo. Nesse momento as correções ϕ' (equação 4.33) serão todas nulas, chegando-se portanto à convergência da parte hidrodinâmica do problema.

O cálculo das velocidades contravariantes nas faces é de crucial importância no sucesso da solução do acoplamento pressão-velocidade quando se usa o arranjo colocalizado. Detalhes sobre a determinação das velocidades contravariantes nas faces a partir das velocidades cartesianas encontram-se no trabalho de Marchi e Maliska (1994).

4.8 - Solução dos Sistemas Lineares

O conjunto de equações discretizadas de cada variável constitui um sistema linear da forma

$$A_{ij}^{\phi} \phi_j = B_i^{\phi} \quad (4.40)$$

A matriz dos coeficientes tem tamanho $N \times N$, sendo N o número de volumes em que o domínio foi discretizado. Como empregamos malha estruturada, a matriz A é uma matriz com 19 diagonais não nulas, sendo 5 bandas de 3 diagonais adjacentes e mais 4 diagonais isoladas.

Os sistemas lineares para u_i , θ , k , ϵ são resolvidos pelo esquema ADI (*Alternate Direction Implicit* - Silva, 1991 e Peaceman, 1955), que é um método iterativo baseado na aplicação sucessiva do esquema TDMA (*TriDiagonal-Matrix Algorithm*, ou algoritmo de Thomas) nas três direções do problema. No começo do processo iterativo é calculado o resíduo inicial.

$$r_0 = \left[\sum_{i=1,N} \left(A_{ij}^{\phi} \phi_j - B_i^{\phi} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (4.41)$$

O sistema de equações é considerado resolvido quando o resíduo é reduzido a uma fração do resíduo inicial ou quando é atingido o número máximo de iterações previamente definido. Adotamos como 10% do resíduo inicial o valor ao qual deve ser reduzido o resíduo do sistema para que o mesmo seja considerado resolvido. Constatamos que em uma ou duas iterações esse critério é atingido. Note que como estamos resolvendo segregadamente um sistema não linear de equações diferenciais governantes do modelo, não há necessidade de se resolver os sistemas de equações algébricas de cada variável individualmente com grande precisão, mas apenas com aquela necessária para permitir a convergência.

No caso do sistema de equações para a pressão, ou mais precisamente, para a correção da pressão, P' (sobre a qual comentamos na seção anterior), constatamos que o método ADI geralmente não é adequado, porque não consegue reduzir satisfatoriamente o resíduo do sistema (“não consegue resolver o sistema”). Como consequência, a conservação da massa não é adequadamente satisfeita e a convergência da solução (do sistema de equações diferenciais) é muito lenta. Na verdade, no problema hidrodinâmico o sistema de equações para a pressão é sempre o mais difícil de ser resolvido.

Adotamos então para a solução do sistema de equações para a pressão o método GMRES, que é um método muito mais robusto que o TDMA. Em linhas gerais, o GMRES faz inicialmente um pré-condicionamento da matriz, a decomposição LU e então resolve recursivamente o sistema. Empregando o GMRES foi possível adotar também para a pressão o critério de 10% do resíduo inicial (usado para as outras variáveis) para o término do processo iterativo de solução do sistema de equações.

4.9 - Controle do Avanço da Solução

Nosso objetivo é obter a solução em regime permanente das equações do modelo. No entanto, fizemos questão de manter o termo transiente das mesmas. Na verdade, do ponto de vista da solução numérica, o termo transiente constitui-se numa forma de controlar o avanço da solução e conseguir dirigi-la para a convergência. Conforme o passo de tempo utilizado é possível que a solução divirja. Passo de tempo muito grande fatalmente leva à divergência nas primeiras iterações. Por outro lado, um passo de tempo muito pequeno torna o avanço muito lento e a necessidade de muito mais iterações para a convergência da solução. Constatamos também que passos de tempo muito pequenos também levam à divergência . . .

Um problema sério que surge é o fato de que o passo de tempo adequado depende das dimensões do volume elementar e da velocidade. Para eliminar o inconveniente da procura dos passos de tempo grandes o suficiente para acelerar a solução sem no entanto levar à divergência,

adotamos uma formulação que calcula o passo de tempo para cada volume a cada iteração, permitindo o seu controle através de um único parâmetro. Baseamo-nos na formulação “E” proposta por Van Doormal e Raithby (1984). O passo de tempo para cada volume é dado por

$$\Delta t = \frac{E\rho}{J \sum A_{NB} - S_q} \quad (4.42)$$

Para a solução das equações do escoamento (u_i , θ , k , ϵ) adotamos $E=1$. Para a solução da equação da concentração adotamos $E=20$.

4.10 - Algoritmo da Solução Numérica

Com o intuito de apresentar a sequência utilizada e facilitar a visualização do processo iterativo de solução, a figura 4.5 mostra o algoritmo da solução numérica segregada do sistema de equações governantes.

4.11 - Critério de Convergência

Em problemas de engenharia que envolvam uma metodologia numérica iterativa para resolver uma equação ou um sistema de equações, a solução é considerada convergida quando as mudanças que ocorrem de uma iteração para outra nas variáveis do problema (ou em parâmetros de interesse envolvendo essas variáveis) são suficientemente pequenas a ponto de se poder considerar que “para os fins a que se destina, a solução não está mudando mais”.

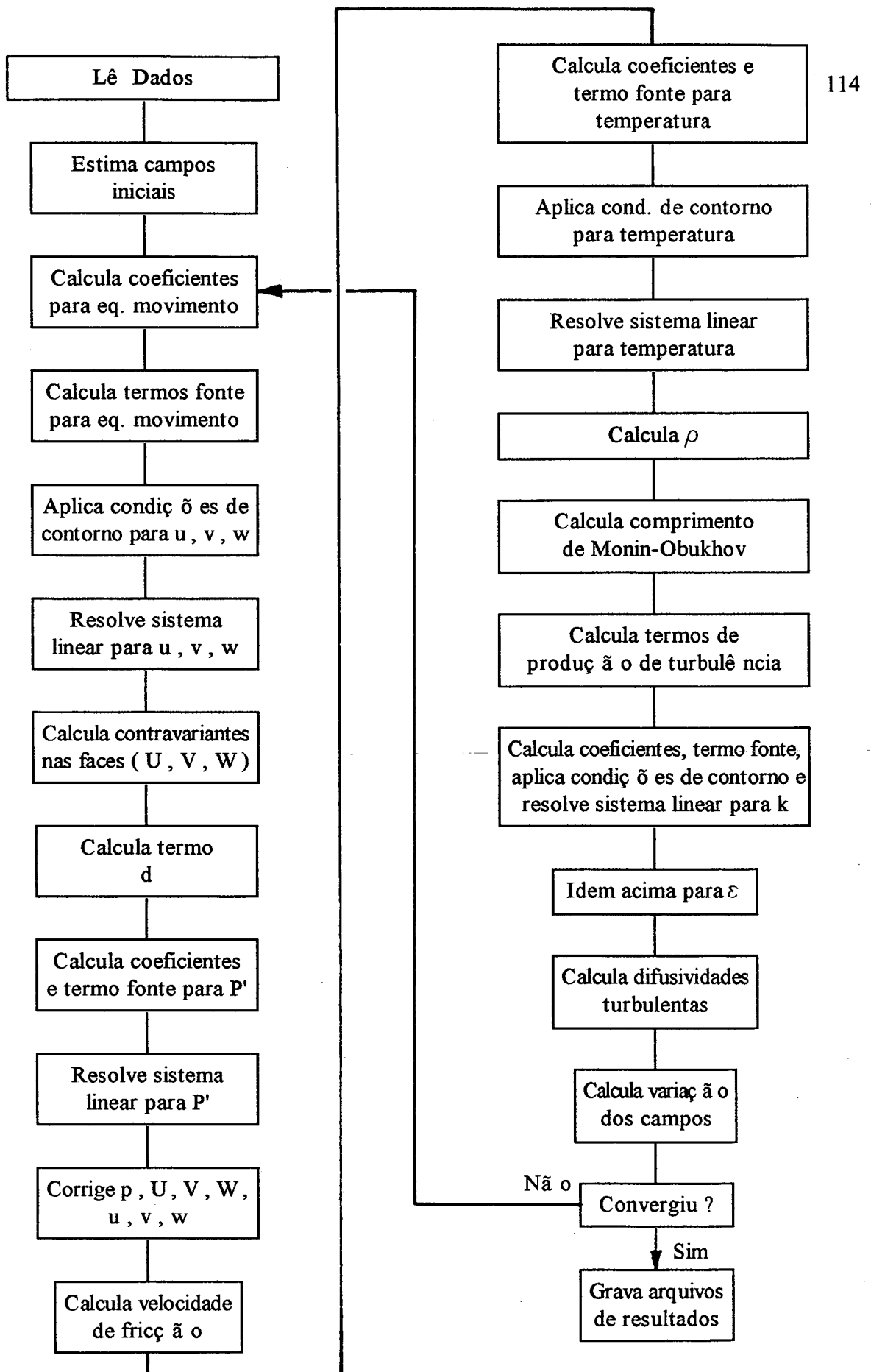


Figura 4.5 - Algoritmo da solução numérica

O critério que adotamos é o de calcular a variação relativa (que chamamos de resíduo) das variáveis de interesse e interromper a solução quando esta variação for suficientemente pequena ($\leq \zeta$). Ou seja, a solução está convergida quando

$$\frac{\phi^{t+\Delta t} - \phi^t}{\phi_{\max}^{t+\Delta t} - \phi_{\min}^{t+\Delta t}} \leq \zeta \quad (4.43)$$

Da solução do escoamento na CLA, o que nos interessa são os campos de velocidade (u , v , w) e de difusividades turbulentas (K_{hor}^m e K_z^h), os quais serão necessários para a solução da concentração. Assim, apenas essas variáveis são consideradas no critério de convergência da solução do escoamento. O valor adotado para ζ é 10^{-5} .

Constatamos em alguns casos que essas variáveis apresentavam seus resíduos diminuindo até uma determinada iteração e a partir daí passavam a oscilar em torno de um valor em certas regiões (alguns volumes da malha), enquanto que no restante do domínio seus resíduos continuavam a diminuir. Isto ocorreu nos casos de malha refinada. Como os resíduos máximos (que ocorrem nos volumes onde há oscilação) não caem abaixo de um certo valor (em geral 10^{-3}), adotamos para os casos em que há oscilação localizada, o critério de convergência (equação 4.43) sobre a média dos resíduos em toda a malha (verificando também se os máximos resíduos ocorriam nas regiões com oscilação e se estes não eram superiores a 10^{-3}). O valor de ζ para os resíduos médios é 10^{-5} . Note que o problema somente é considerado convergido quando todas as variáveis de interesse satisfizerem o critério descrito.

No caso da concentração, não há problemas de oscilação e a queda dos resíduos é constante. Como a amplitude de variação do campo de concentração é muito grande (em média 4 ordens de grandeza), é necessário que o critério de convergência para a concentração seja mais rigoroso do que o critério para o escoamento (em que a amplitude dos campos é comparativamente muito menor). O valor de ζ para o resíduo máximo da concentração é 10^{-7} .

4.12 - Tratamento do Termo Fonte

É necessário que os termos fontes não lineares sejam previamente linearizados, para que o conjunto de equações discretizadas forme um sistema linear. Após linearizados, os termos fonte podem ser escrito de uma forma geral como

$$S = S_q \phi + S_c \quad (4.44)$$

Para melhorar as características da matriz dos coeficientes, o termo S_q deve ser negativo. Isto faz com que o coeficiente central A_p seja maior, melhorando a dominância diagonal da matriz, e facilita a solução do sistema linear.

Variáveis que não podem (pela sua definição) assumir valores negativos, como energia cinética turbulenta (k) e a sua taxa de dissipação (ϵ), necessitam um tratamento especial em seus termos fontes. A possibilidade de que, durante o processo iterativo, uma dessas variáveis assumam valores negativos pode levar à instabilidade e possivelmente à divergência da solução. Para garantir que k e ϵ sejam sempre positivos os termos fontes de suas equações são tratados de uma forma especial, como exposto nas próximas duas seções. Caso a equação da concentração tenha um termo de reação, o seu tratamento deve ser análogo àquele dispensado para k e ϵ . As demais equações (Navier-Stokes e energia) contêm apenas termos fontes lineares, que não necessitam de tratamento especial.

4.12.1 - Linearização do Termo Fonte para a Energia Cinética Turbulenta (k)

O termo fonte transformado de k é

$$\hat{S}^k = \hat{P} + \hat{G} - \frac{\rho \varepsilon}{J} \quad (4.45)$$

O termo de produção por cisalhamento do escoamento (\hat{P}) é sempre positivo, e o termo de empuxo (\hat{G}) pode ser positivo ou negativo, conforme a estratificação seja, respectivamente, instável ou estável. O termo fonte é então rescrito como

$$\hat{S}^k = S_q k + S_c \quad (4.46)$$

com

$$\begin{aligned} S_q &= -\frac{\rho \varepsilon}{J k^*} & e & & S_c &= \hat{P} + \hat{G} & (\text{se } \hat{G} > 0) \\ S_q &= \frac{J \hat{G} - \rho \varepsilon}{J k^*} & e & & S_c &= \hat{P} & (\text{se } \hat{G} < 0) \end{aligned} \quad (4.47)$$

k^* é o valor de k da iteração anterior. Note que quando a convergência for atingida $k=k^*$ e a forma original do termo fonte é recuperada. Este artifício de linearização garante que k seja sempre positivo durante o avanço da solução, evitando os problemas de instabilidade e divergência advindos de valores negativos de k , que são fisicamente incoerentes.

4.12.2 - Linearização do Termo Fonte para a Taxa de Dissipação da Energia Cinética Turbulenta (ε)

O termo fonte transformado de ε é

$$\hat{S}^\varepsilon = \left[C_{1\varepsilon} (\hat{P} + \hat{G}) - C_{2\varepsilon} \rho \varepsilon \right] \frac{\varepsilon}{k} \quad (4.48)$$

Podemos rescreve-lo como

$$\hat{S}^\varepsilon = \alpha \varepsilon^2 + \beta \varepsilon \quad (4.49)$$

onde

$$\alpha = -\frac{C_{2\varepsilon} \rho}{Jk} \quad (< 0) \quad (4.50)$$

$$\beta = \frac{C_{1\varepsilon}}{k} (\hat{P} + \hat{G}) \quad (\geq 0 \text{ ou } < 0) \quad (4.51)$$

O termo quadrático é linearizado conforme proposto por Patankar (1980)

$$S = S^* + \frac{\partial S^*}{\partial \varepsilon} (\varepsilon - \varepsilon^*) \quad (4.52)$$

O superescrito * denota valor da iteração anterior. Chamando de S_1 o termo quadrático linearizado, temos

$$S_1 = -\alpha \varepsilon^{*2} + 2\alpha \varepsilon^* \varepsilon \quad (4.53)$$

Para o termo linear (chamado de S_2) o tratamento dado é

$$\begin{aligned} S_2 &= \beta \varepsilon & (\text{se } \beta < 0) \\ S_2 &= \beta \varepsilon^* & (\text{se } \beta > 0) \end{aligned} \quad (4.54)$$

Compondo os termos quadrático e linear temos

$$\hat{S}^\varepsilon = S_q \varepsilon + S_c \quad (4.55)$$

com

$$\begin{aligned} S_q &= 2\alpha \varepsilon^* & \text{e} & S_c = -\alpha \varepsilon^{*2} + \beta \varepsilon^* & (\text{se } \beta > 0) \\ S_q &= 2\alpha \varepsilon^* + \beta & \text{e} & S_c = -\alpha \varepsilon^{*2} & (\text{se } \beta < 0) \end{aligned} \quad (4.56)$$

Da mesma forma que ocorre para o termo fonte linearizado de k , quando a convergência for atingida $\varepsilon = \varepsilon^*$ e a forma original do termo fonte é recuperada. Esta linearização garante que ε seja sempre positivo durante o avanço da solução, bem como melhora a matriz dos coeficientes para ε , no sentido de torna-la mais diagonalmente dominante.

4.13 - Aplicação das Condições de Contorno

Os problemas de escoamento na CLA apresentam tipicamente três tipos de fronteiras no domínio. A fronteira a montante (em relação ao vento), onde há entrada de massa, a fronteira a jusante, onde há saída de massa e as fronteiras laterais, superior e inferior (solo) que são consideradas impermeáveis. Em todas as seis fronteiras do domínio tridimensional (ver figura 2.1) é necessária a imposição de condições de contorno para a solução das equações do modelo. A técnica empregada em nossa metodologia numérica para tal finalidade é o uso de volumes fictícios. Designamos de volume fictício um volume de controle que esteja fora do domínio de cálculo mas adjacente as suas fronteiras. Em essência, os valores assumidos pelas variáveis nos volumes fictícios são tais que os fluxos convectivos e difusivos nas fronteiras respeitam as condições de contorno do problema.

Uma outra forma de aplicar as condições de contorno seria fazer o balanço das variáveis em todos os volumes de fronteira, alterando adequadamente a forma de escrever a equação (4.22) para levar em consideração os fluxos convectivos e difusivos de acordo com o tipo de condição de contorno. Com volumes fictícios, a aplicação das condições de contorno é mais simples do que a integração nos volumes de fronteira. Entretanto, a memória computacional

requerida é maior pois tem-se mais volumes no problema. A nossa opção por adotar volumes fictícios deveu-se ao fato de que o programa NAVIER, desenvolvido no SINMEC, originalmente usava esta técnica. Entendemos que a integração nos volumes de fronteiras é mais adequada quando se empregam malhas não ortogonais, embora seja mais trabalhosa. Isto justifica-se pelo fato de que com volumes fictícios, em coordenadas generalizadas não ortogonais, deve-se tomar muito cuidado com os termos de derivada cruzada (ver equação 4.30) que aparecem nas equações transformadas, pois estes podem acarretar a aplicação de uma condição de contorno diferente daquela que se pretende. Outro cuidado importante no caso de se adotar volumes fictícios é o de usar como função de interpolação o *upwind* puro na fronteira de entrada de massa, o que é fisicamente consistente.

Detalhes a respeito da aplicação da técnica de volumes fictícios podem ser encontrados em Maliska (1995).

4.14 - Os Códigos Computacionais

O código NAVIER (1991) foi desenvolvido no Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor (SINMEC - Dep. Eng. Mecânica - UFSC) para a solução de escoamentos tridimensionais laminares viscosos a qualquer velocidade (compressível ou incompressível). Ele utiliza a técnica de volumes finitos em coordenadas curvilíneas generalizadas, arranjo colocalizado de variáveis e aproximação dos fluxos pelo esquema WUDS.

Em nosso trabalho estendemos o código NAVIER para resolver escoamentos turbulentos, em particular, o escoamento de ar na camada limite atmosférica. As características básicas do código original foram mantidas, mas algumas mudanças significativas foram implementadas. Entre elas, a possibilidade de empregar um esquema de alta ordem (QUICK, discutido na seção 4.3.1) para a aproximação dos fluxos convectivos, a formulação “E” para o cálculo automático do passo de tempo, nova forma de calcular as velocidades cartesianas e

contravariantes nas faces dos volumes e o uso do método GMRES para a solução da equação da pressão. A principal contribuição foi a implementação do modelo de turbulência, com opção para o k-ε clássico (isotrópico) ou o k-ε modificado apresentado na seção 2.4.2. Por ser um modelo anisotrópico, o k-ε modificado exigiu grandes alterações no código original, na parte que toca os termos difusivos. Os contrastes vieram, no entanto, após a implementação. As grandes dificuldades de convergência encontradas mesmo em problemas simples exigiram tentativas e testes das mais diversas formas para controlar o avanço das variáveis turbulentas, até que se encontrassem as formas adequadas de sub-relaxação que conduzissem os problemas à convergência. Os problemas em malha grosseira (da ordem de 35x35x20 volumes) requerem sub-relaxação nas difusividades turbulentas e no termo de produção de energia cinética turbulenta (P) até por volta das cem primeiras iterações. Nos casos de malha refinada (em torno de 70x70x40), a sub-relaxação deve ser aplicada também nas próprias variáveis turbulentas (k e ε) e durante toda a solução, ou seja, até a convergência. Os fatores de sub-relaxação adotados foram progressivos, variando de 0,1 a 1 nos casos de malha grosseira e de 0,05 a 0,3 para malha fina. A variável sub-relaxada (subscrito 'sr') é calculada por

$$\phi_{sr} = \alpha \phi^{t+\Delta t} + (1-\alpha) \phi^t \quad (4.57)$$

onde α é o coeficiente de sub-relaxação.

Para a solução numérica da equação da concentração foi implementado o programa SMOKE, que utiliza os campos de velocidade e difusividades turbulentas calculados pelo NAVIER (solução do escoamento) para prever o campo de concentração. Como é (geralmente) uma equação linear, a equação da concentração não oferece dificuldades para a solução numérica, a qual tem convergência rápida. As características da metodologia numérica implementadas no SMOKE são as mesmas adotadas no NAVIER. O esquema QUICK é utilizado para aproximar os fluxos convectivos e diferenças centrais para os difusivos. O método ADI é usado para a solução do sistema linear e o arranjo de variáveis é o colocalizado.

Como a malha empregada para a solução do escoamento não é adequada para o cálculo da concentração, faz-se necessário interpolar os campos de velocidade e difusividades

turbulentas obtidas da solução do escoamento para a nova malha, utilizada para a equação da concentração. Com esta finalidade foi implementado o programa INTERGRID, o qual é encarregado de calcular (interpolando linearmente a partir de valores disponíveis na malha do escoamento) as velocidades cartesianas nas faces dos volumes (e com estas determinar as contravariantes) e as difusividades turbulentas que serão necessárias, respectivamente, para o cálculo dos fluxos convectivos e difusivos de massa.

4.15 - Geração das Malhas

As malhas necessárias para a solução do escoamento e da dispersão de massa foram geradas algebricamente. Devido às características diferentes de comportamento das variáveis no cálculo do escoamento e da concentração, malhas diferentes foram empregadas. No caso do escoamento, os principais gradientes (de u_i , θ , k , ε) encontram-se próximos do solo e em regiões de acidentes do terreno (topografia não plana). A malha deve então ser mais refinada nesses locais. Um procedimento comum é o de aumentar a altura dos volumes numa progressão geométrica à medida em que se afasta do solo. Já para a dispersão de poluentes, os principais gradientes estão próximos da fonte, onde então a malha deve ser mais refinada. Novamente aqui adotou-se aumentar o tamanho dos volumes numa progressão geométrica, à medida em que se afasta da fonte. Também, à medida em que a pluma se dispersa, a região próxima do solo passa a ser importante e a malha deve contemplá-la com uma maior concentração de volumes na proximidade do solo. Figuras que ilustram as malhas empregadas são mostradas nos capítulos de resultados, juntamente com a descrição dos problemas estudados.

Como utilizamos para a concentração uma malha diferente daquela em que o escoamento foi resolvido (por ser muito mais apropriada), é necessária a interpolação dos dados do escoamento para a nova malha onde será calculada a dispersão. O programa INTERGRID (comentado na seção anterior) foi desenvolvido para esse fim.

Para a simulação do escoamento em terrenos acidentados reais com a intenção de prever-se a dispersão de poluentes, faz-se necessária a consideração de diversas direções predominantes do vento na região, de acordo com a rosa dos ventos local. Assim, para cada direção de vento considerada, é adequado construir-se uma malha tal que a fronteira a montante resulte normal à direção de entrada do escoamento no problema. O programa TOPOGRID foi desenvolvido e implementado para gerar malhas sobre uma topografia qualquer de terreno fornecida. Esta topografia deve ser digitalizada e armazenada num arquivo de dados de elevação do terreno em um sistema coordenado cartesiano alinhado com as direções norte-sul e leste-oeste. Embora normalmente seja conveniente este alinhamento, ele não é necessariamente requerido pelo programa. Uma vez gerada algebricamente a malha sobre terreno plano, esta é fornecida juntamente com o arquivo de topografia do terreno e a direção do vento como dados de entrada do programa TOPOGRID, que irá então gerar a malha final para o problema, com as elevações do terreno interpoladas (linearmente) a partir do arquivo de topografia. Este procedimento é aplicado tanto para gerar malhas para o cálculo do escoamento quanto da concentração. Obviamente, sem o programa TOPOGRID, a geração individual de malhas para cada direção de vento, com a necessária leitura das elevações das coordenadas da malha em função da topografia do terreno, seria por demais trabalhoso e antiprodutivo.

CAPÍTULO 5

VALIDAÇÃO DO CÓDIGO COMPUTACIONAL

Neste capítulo apresentamos alguns escoamentos bi e tridimensionais que foram resolvidos com os objetivos de testar o funcionamento das novas rotinas implementadas no código NAVIER e comparar nossos resultados com outros disponíveis a fim de podermos validar o programa computacional. Como trata-se de um programa tridimensional para a solução de um conjunto de equações diferenciais não lineares, a tarefa de validação da implementação do código é bastante problemática e também questionável. A rigor, somente problemas com solução analítica (ou numérica, tipo *benchmark*) serviriam para validar um código numérico de forma segura. No caso de escoamentos de fluidos isto geralmente só é possível em problemas unidimensionais simples.

Na verdade, o objetivo deste capítulo não é o de concluir afirmando que a solução numérica está isenta de erros de implementação, mas sim de mostrar o cuidado que tivemos em aplicar (“rodar”) o programa para diversos tipos de problemas turbulentos na busca de erros de implementação. Durante aproximadamente um ano (desde que iniciamos as mudanças no NAVIER) alteramos muitas rotinas do programa original e também implementamos uma série de novas rotinas. Isto foi feito de maneira gradativa e continuamente acompanhada de testes. De fato, durante os casos preliminares estudados, os quais são neste capítulo expostos, tivemos a oportunidade de encontrar e sanar diversos erros de implementação bem como de corrigir um grave problema de não conservação da massa que ocorria em alguns tipos de problemas.

O código NAVIER original resolve problemas tridimensionais laminares (compressíveis ou não), conforme já comentado na seção 4.14 do capítulo anterior. Essa versão - que chamamos de original - sofreu um processo de validação, o qual está descrito no relatório elaborado por Maliska et al (1992), que foi apresentado ao IAE - Instituto de Aeronáutica e Espaço (Centro Tecnológico da Aeronáutica). Esse mesmo programa foi utilizado por Marchi (1992) em sua dissertação de mestrado, onde foi concluído que “o modelo numérico implementado reproduz adequadamente a maioria dos fenômenos físicos que ocorrem nos escoamentos tridimensionais sobre o foguete brasileiro VLS.” Ainda naquele trabalho é enfatizado que o modelo numérico pode ser aplicado na solução de outros tipos de escoamentos que possam ser modelados matematicamente pelas equações de conservação da massa, quantidade de movimento e energia. Desta forma, ao procedermos as mudanças no código a fim de capacitá-lo para resolver também escoamentos turbulentos, assumimos que as rotinas originais estão corretamente implementadas.

Alguns problemas testes são bidimensionais. Para esses problemas realizamos as simulações alterando as direções consideradas dentro do programa 3D. Por exemplo, resolve-se o problema 2D posicionando-se a malha nas direções ξ , η (x , y) e depois nas direções ξ , γ (x , z). Obviamente as soluções numéricas devem ser as mesmas. Esta é uma forma de detectar erros de implementação. Outra, também utilizada, é a de resolver por inteiro um problema que apresenta solução simétrica, e verificar a simetria da solução numérica.

5.1 - Escoamento Turbulento Entre Placas Paralelas

O problema do desenvolvimento do escoamento de um fluido entre placas paralelas é geralmente um dos primeiros a ser adotado para testar a solução numérica de problemas com entrada e saída de massa.

5.1.1 - Descrição do Problema

A figura 5.1 mostra esquematicamente as características do problema simulado. O escoamento tem na entrada um perfil constante de velocidade, temperatura e propriedades turbulentas. No caso do problema puramente hidrodinâmico não há fluxo de calor nas placas. O número de Reynolds na entrada, baseado na distância entre as placas, é 140 000 . O problema foi resolvido sem a consideração da condição de simetria para verificar-se a sua ocorrência na solução numérica. A razão entre o comprimento e a distância entre placas é 73.2 .

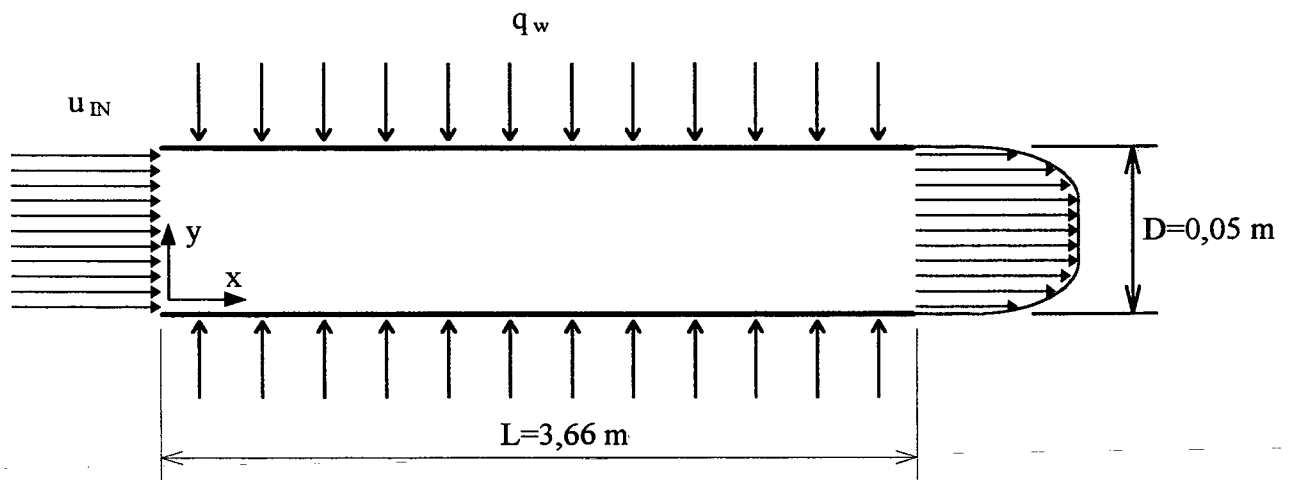


Figura 5.1 - Escoamento entre placas paralelas

5.1.2 - Equações Governantes

São aquelas apresentadas no capítulo 2, devidamente simplificadas para o problema em questão. Trata-se de escoamento incompressível, sem forças de campo.

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (5.1)$$

$$\rho \frac{Du_i}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (5.2)$$

$$\rho \frac{DT}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \quad (5.3)$$

O tensor de Reynolds é modelado pelo k-ε clássico (seção 2.4.1).

$$\tau_{ij} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (5.4)$$

Energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação são calculadas pelas equações (2.52) e (2.55). O número de Prandlt turbulento é $Pr_t = 0,6$ e as demais constantes constam na tabela 2.1.

5.1.3 - Condições de Contorno

Na entrada do escoamento todas as variáveis são prescritas. Velocidade e temperatura são, respectivamente, $u_{in} = 41.75 \text{ m/s}$ e $T_{in} = 279 \text{ K}$. Energia cinética turbulenta é calculada considerando-se as flutuações de velocidade como sendo 5% da velocidade média. Isto resulta em

$$k_{in} = 0.75\% \frac{u_{in}^2}{2} \quad (5.5)$$

A taxa de dissipação de k é dada por

$$\varepsilon_{in} = \frac{C_\mu^{3/4} k^{3/2}}{l} \quad (5.6)$$

O comprimento de escala da turbulência na entrada é $l = 0.07 D$.

Na saída os fluxos difusivos são nulos (escoamento localmente parabólico). A lei da parede é aplicada para a determinação dos fluxos difusivos de quantidade de movimento e de

calor nas placas (Launder e Spalding, 1974). Os fluxos convectivos são nulos porque a parede é impermeável.

$$\frac{u_p}{u_*} = \frac{1}{k_v} \ln \left(\frac{E z_p C_\mu^{1/4} k_p^{1/2}}{\nu} \right) \quad (5.7)$$

u_p e k_p são os valores de velocidade e energia cinética nos volumes adjacentes à parede, z_p é a distância da parede, $u_* = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}$ é a velocidade de fricção, τ_w é a tensão cizalhante na parede, E é uma constante, que para parede lisa vale 9. O subscrito 'w' denota valores na parede.

$$\frac{(T_p - T_w) C_p \rho C_\mu^{1/4} k_p^{1/2}}{q_w} = \frac{Pr_t}{k_v} \ln(E y^+) + c \quad (5.8)$$

O fluxo de calor é $q_w = 5000 \text{ W / m}^2$. O fluxo difusivo de energia cinética turbulenta é nulo nas paredes e a sua taxa de dissipação é calculada para os volumes adjacentes às placas por

$$\epsilon_p = \frac{C_\mu^{3/4} k_p^{3/2}}{k_v z_p} \quad (5.9)$$

5.1.4 - Solução Numérica

As características da solução numérica são aquelas apresentadas no capítulo 4. O esquema WUDS (seção 4.4.1) foi utilizado para avaliar as variáveis e suas derivadas nas faces dos volumes e o método ADI (seção 4.8) foi adotado para a solução do sistema de equações para a correção da pressão (p'). A malha empregada possui 78x21 volumes, igualmente espaçados na direção do escoamento. Na direção perpendicular, a malha é mais refinada próximo às paredes, como mostra a figura 5.2.

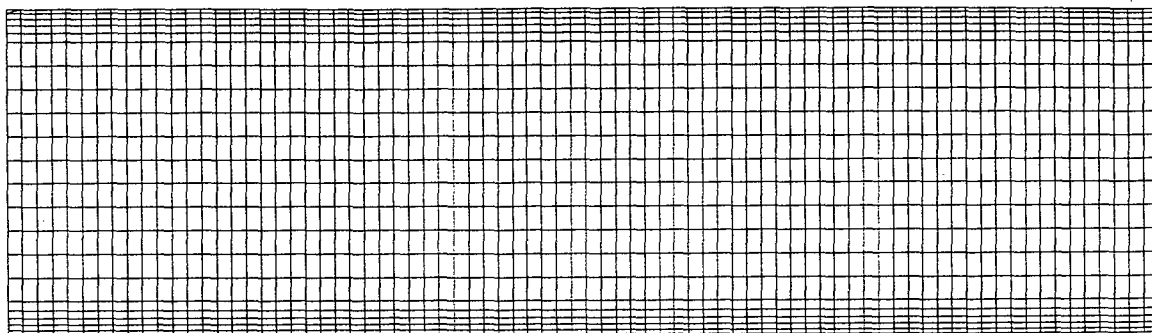


Figura 5.2 - Malha para o problema de placas paralelas (dimensão vertical exagerada)

5.1.5 - Resultados

Dois casos de escoamento turbulento entre placas planas foram simulados. No primeiro caso o fluxo de calor é nulo e, portanto, a equação da energia não é resolvida. O segundo caso é de convecção forçada, com fluxo de calor prescrito na placas. O campo de velocidades é o mesmo para os dois casos. Na verdade, uma vez resolvido o problema hidrodinâmico (primeiro caso), basta introduzir o campo de velocidade e difusividade turbulenta na equação da energia para resolver o problema térmico (segundo caso), o qual é desacoplado do primeiro.

Vasconcellos (1993, 1994) utilizou o k-ε clássico e um código bidimensional na solução desse problema. A figura 5.3 mostra a componente longitudinal da velocidade ao longo do desenvolvimento do escoamento a diversas distâncias da placa. A figura 5.4 mostra o comportamento do número de Stanton para o caso com fluxo de calor.

$$St = \frac{q_w}{\rho u_b C_p (T_w - T_b)} \quad (5.10)$$

onde u_b e T_b são, respectivamente, a velocidade e a temperatura média de mistura. O subscrito 'w' refere-se à parede (placa).

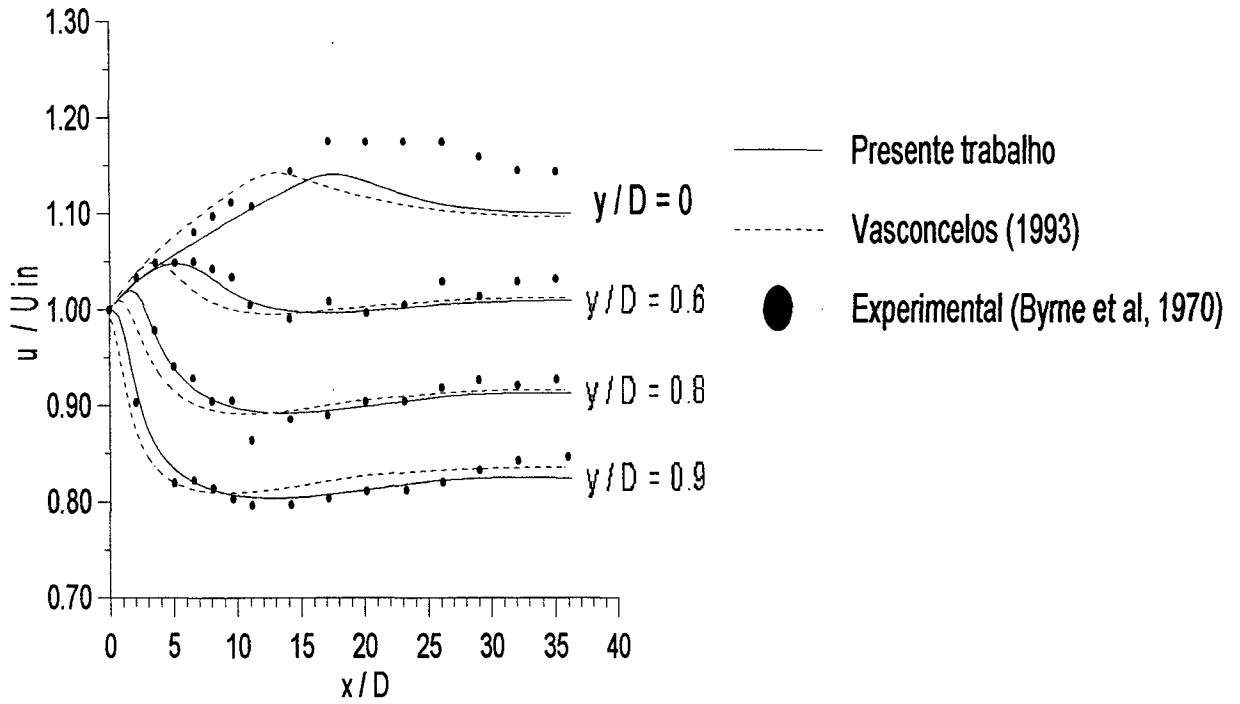


Figura 5.3 - Perfis de velocidade no escoamento entre placas paralelas

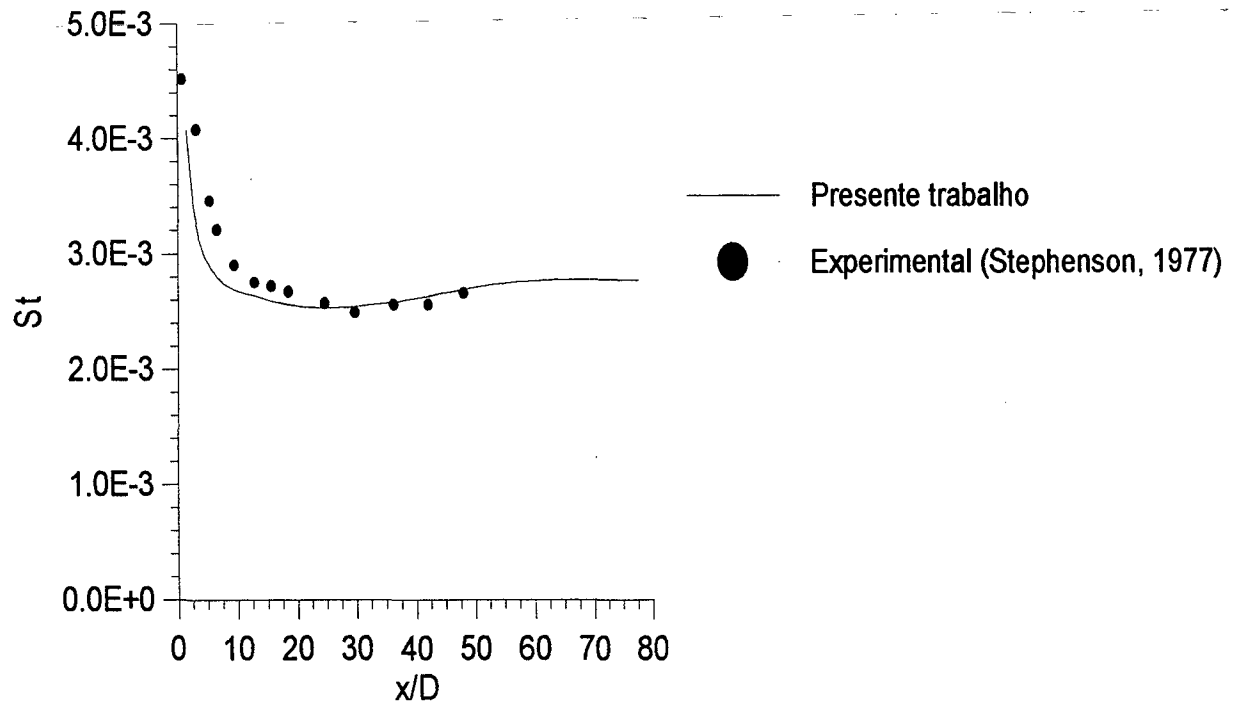


Figura 5.4 - Número de Stanton para o problema de placas paralelas

5.2 - Jato Plano

5.2.1 - Descrição do Problema

O caso do jato descarregado em um ambiente estagnado é um problema típico de escoamento livre. Dando prosseguimento aos testes do programa, simulamos dois casos.

- a) Jato puro: a temperatura de descarga do jato é a mesma do ambiente.
- b) Pluma forçada: o fluido é descarregado verticalmente a uma temperatura superior à do ambiente. Neste caso o escoamento é ditado por trocas de quantidade de movimento e calor entre a pluma e o fluido ambiente. Efeitos de empuxo estão presentes.

A figura 5.5 mostra esquematicamente as características dos problemas simulados. Ar é descarregado pelo bocal de largura $D = 0.02$ m no ar ambiente que está a 20°C . Para o jato puro o número de Reynolds da descarga (baseado na dimensão do bocal) é 6382. No caso da pluma, o ar é descarregado a 40°C e o número de Reynolds é 1190.

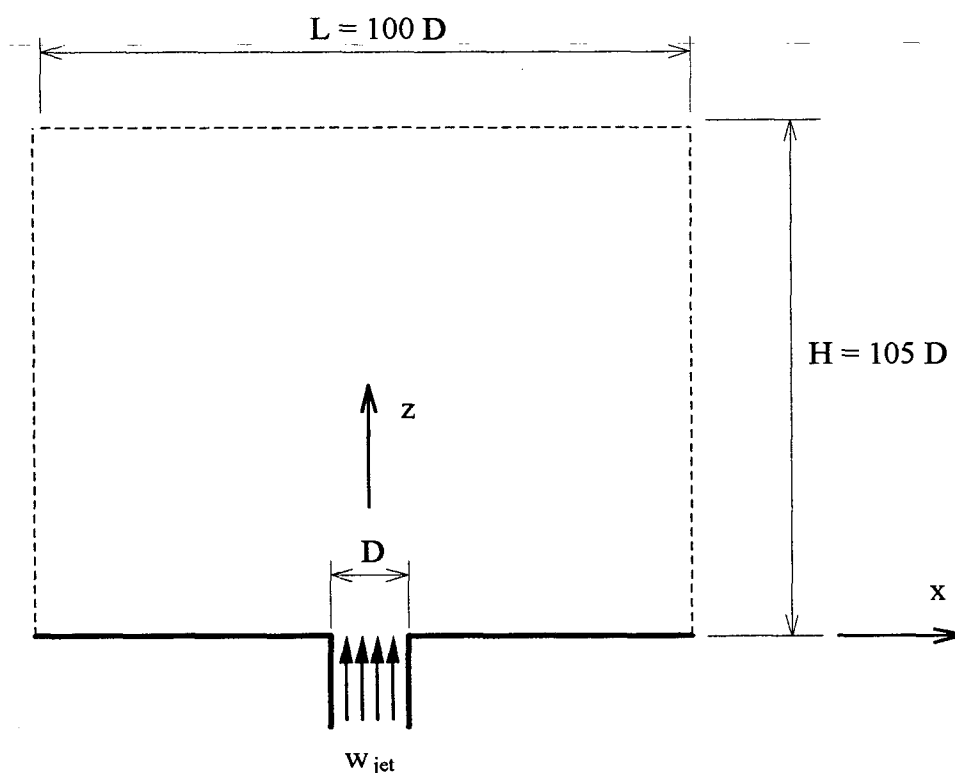


Figura 5.5 - Problema do jato plano turbulento

5.2.2 - Equações Governantes

As equações que modelam matematicamente o problema do jato puro são as mesmas do caso de escoamento entre placas planas, nominalmente equações (5.1), (5.2) e (5.3). No caso da pluma, o termo fonte de empuxo é acrescentado à equação do movimento, a qual torna-se

$$\rho \frac{Du_i}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \tilde{\rho} g \delta_{i3} \quad (5.11)$$

O k-ε clássico (seção 2.4.1) é usado para o cálculo da viscosidade turbulenta. O número de Prandtl turbulento é $Pr_t = 0.614$ e $C_\mu = 0.109$ (Riopelle et al, 1994).

5.2.3 - Condições de Contorno

No bocal de descarga a velocidade na direção vertical e a temperatura são prescritos ($w_{jet} = 5$ e 1 m/s respectivamente para os casos de jato puro e pluma). No caso da pluma, a temperatura de descarga é 20°C acima da temperatura do ambiente. Os valores de k e ϵ na descarga são prescritos baseados na escala de velocidade turbulenta de 5% da velocidade média do jato (w_{jet}) e um comprimento de escala (*mixing length*) igual à largura do bocal (D).

Nas paredes as componentes normal e tangencial da velocidade são nulas, o transporte das variáveis turbulentas também é nulo e a temperatura é prescrita (20°C). Nas fronteiras laterais há entrada de massa que vai se incorporar ao jato (*entrainment*). Aí o fluxo difusivo de quantidade de movimento, bem como k e ϵ , são considerados nulos. No caso da pluma, a temperatura nessas fronteiras é 20°C . Na fronteira de saída todos os fluxos difusivos são nulos (escoamento localmente parabólico).

5.2.4 - Solução Numérica

As características da metodologia numérica são aquelas apresentadas no capítulo 4. Alguns detalhes específicos para este caso são o uso do esquema de interpolação WUDS (seção

4.4.1) e o emprego do método ADI (seção 4.8) para a solução do sistema de equações para a correção da pressão (p'). A malha (ver figura 5.6) tem 30 volumes na direção do jato e 51 na direção transversal, sendo 11 para representar o bocal (fronteira de descarga).

5.2.5 - Resultados

Riopelle et al (1994) também estudaram numericamente os problemas de jato e pluma que simulamos nesta seção. Eles utilizaram volumes finitos em malha cartesiana não igualmente espaçada, arranjo desconstruído de variáveis, esquema WUDS de interpolação e método SIMPLEX para o acoplamento pressão-velocidade. O $k-\epsilon$ foi usado com uma alteração na constante C_μ , cujo valor adotado foi 0.109. A razão para não se utilizar o clássico valor de 0.09 não foi explicada naquele trabalho. Cremos ser devido ao fato de que com o uso de $C_\mu = 0.09$ o nível geral de turbulência é menor e a velocidade no centro do jato é superestimada, como comentam Sini e Dekeyser (1986). Nossos resultados são comparados com aqueles obtidos numericamente por Riopelle et al.

A figura 5.7 mostra os vetores velocidade que obtivemos para o caso do jato puro. Note a entrada de massa que ocorre pelas fronteiras laterais (*entrainment*), que se incorpora ao fluido do jato. Nas figuras 5.8 e 5.9 são mostrados os comportamentos da velocidade e da energia cinética turbulenta na linha de centro e também a variação da meia-largura do jato (b_w). A meia-largura do jato, com respeito à velocidade longitudinal, é definida como a distância (na direção transversal) do centro do jato ao ponto em que a componente longitudinal da velocidade é a metade de seu respectivo valor na linha de centro (que é o máximo naquela posição). Desta maneira, a meia-largura é uma função da distância medida a partir da descarga (na direção longitudinal), e vai crescendo com esta de uma forma praticamente linear, como se pode ver na figura 5.9.

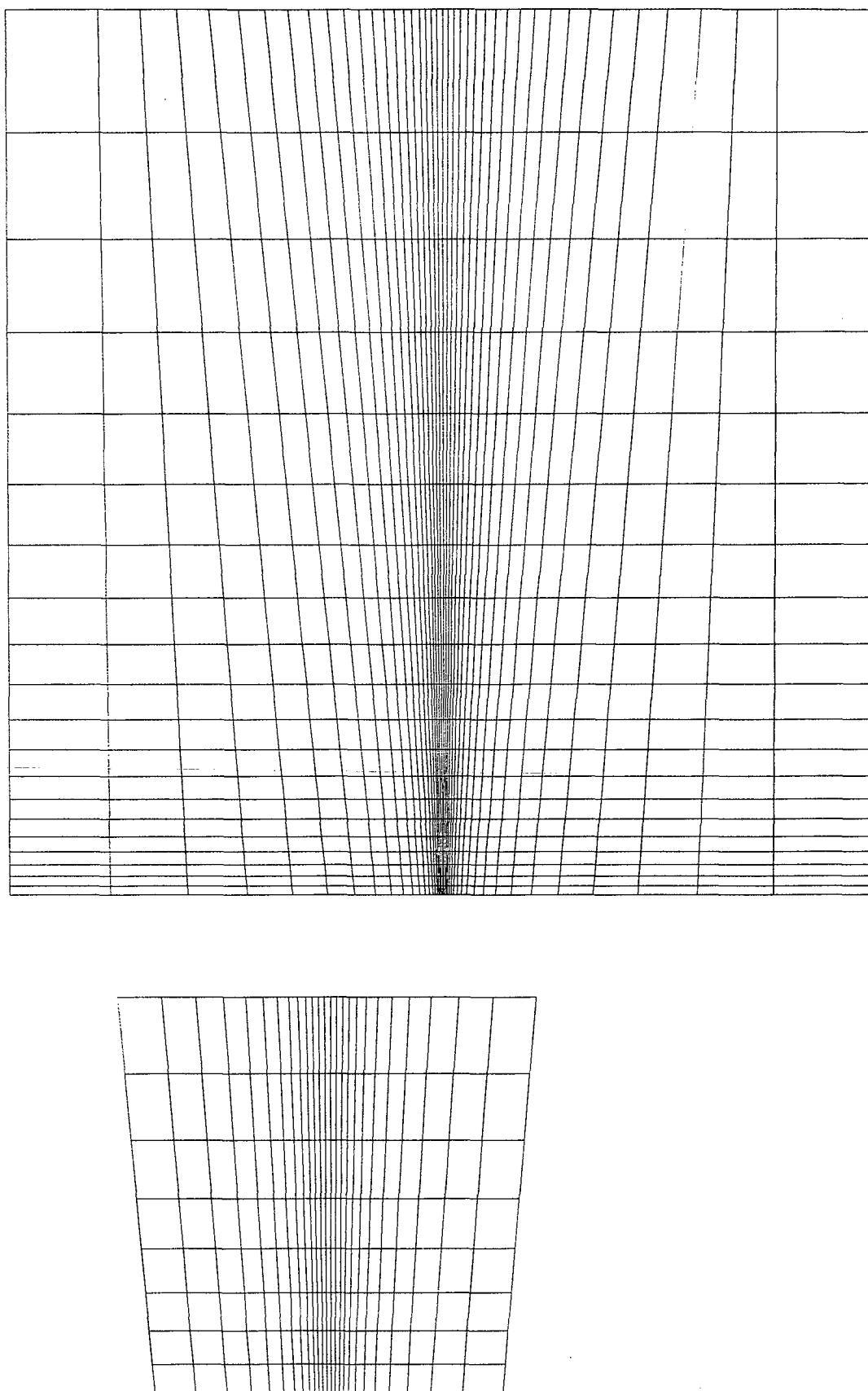


Figura 5.6 - Malha para os problemas de jato e pluma (abaixo, detalhe da região de descarga)

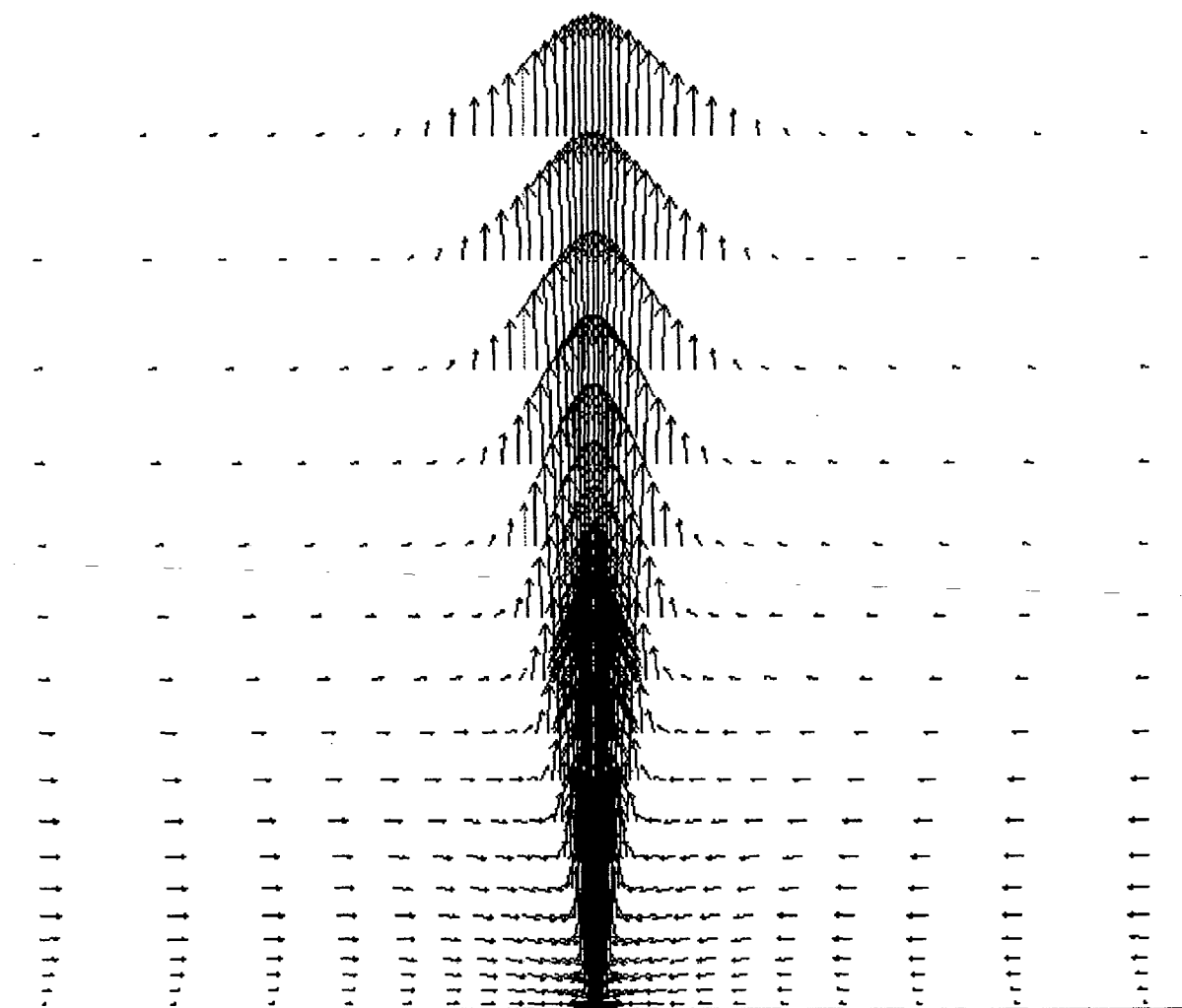


Figura 5.7 - Vetores velocidade para o caso do jato puro

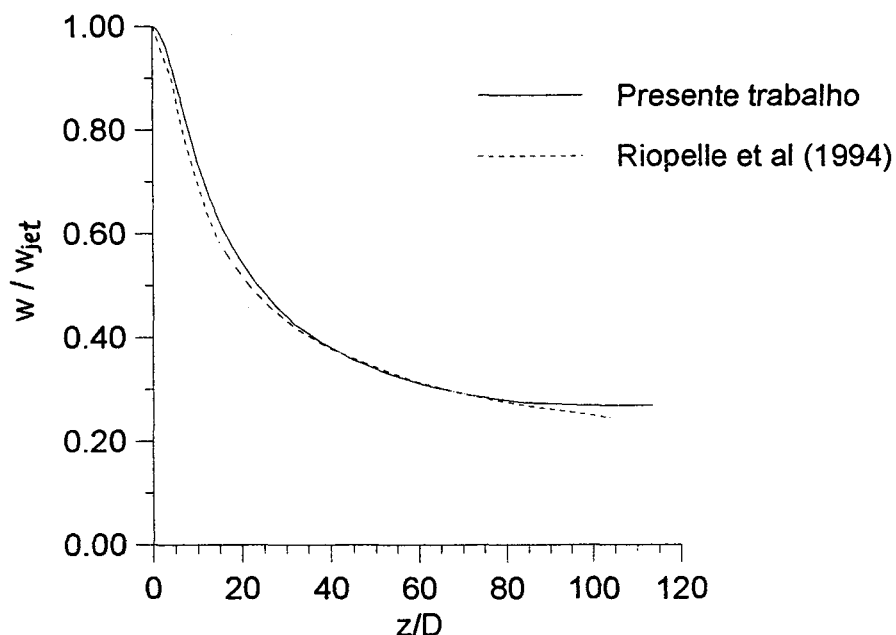


Figura 5.8 - Decaimento da velocidade longitudinal no centro do jato puro

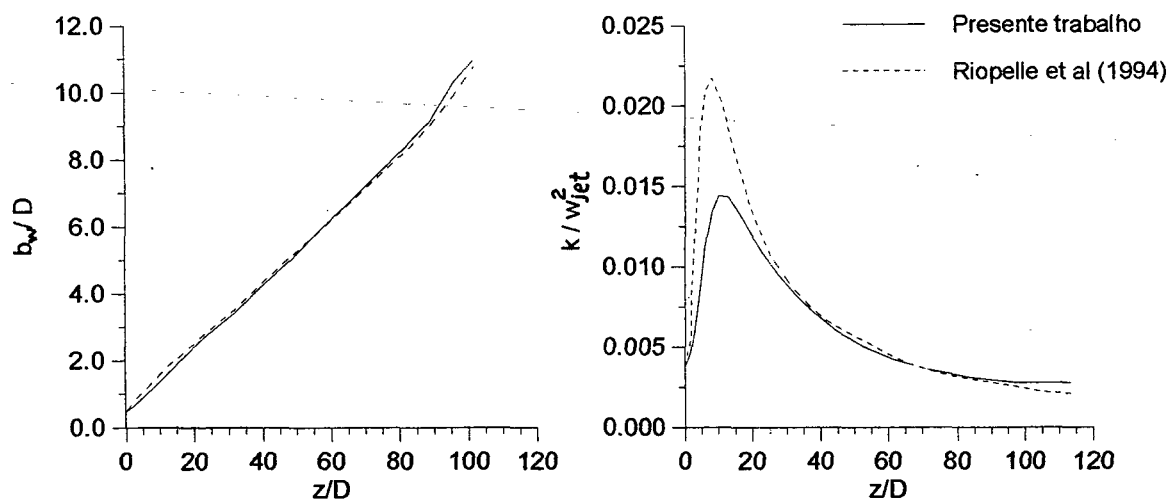


Figura 5.9 - Jato puro: variação longitudinal da meia-largura (esq.) e da energia cinética turbulenta no centro do jato (dir. , adimensionalizada pela velocidade na descarga)

Para o caso da pluma forçada, a figura 5.10 mostra o campo de temperatura e a figura 5.11 apresenta o decaimento da velocidade longitudinal e a energia cinética turbulenta no centro do jato.

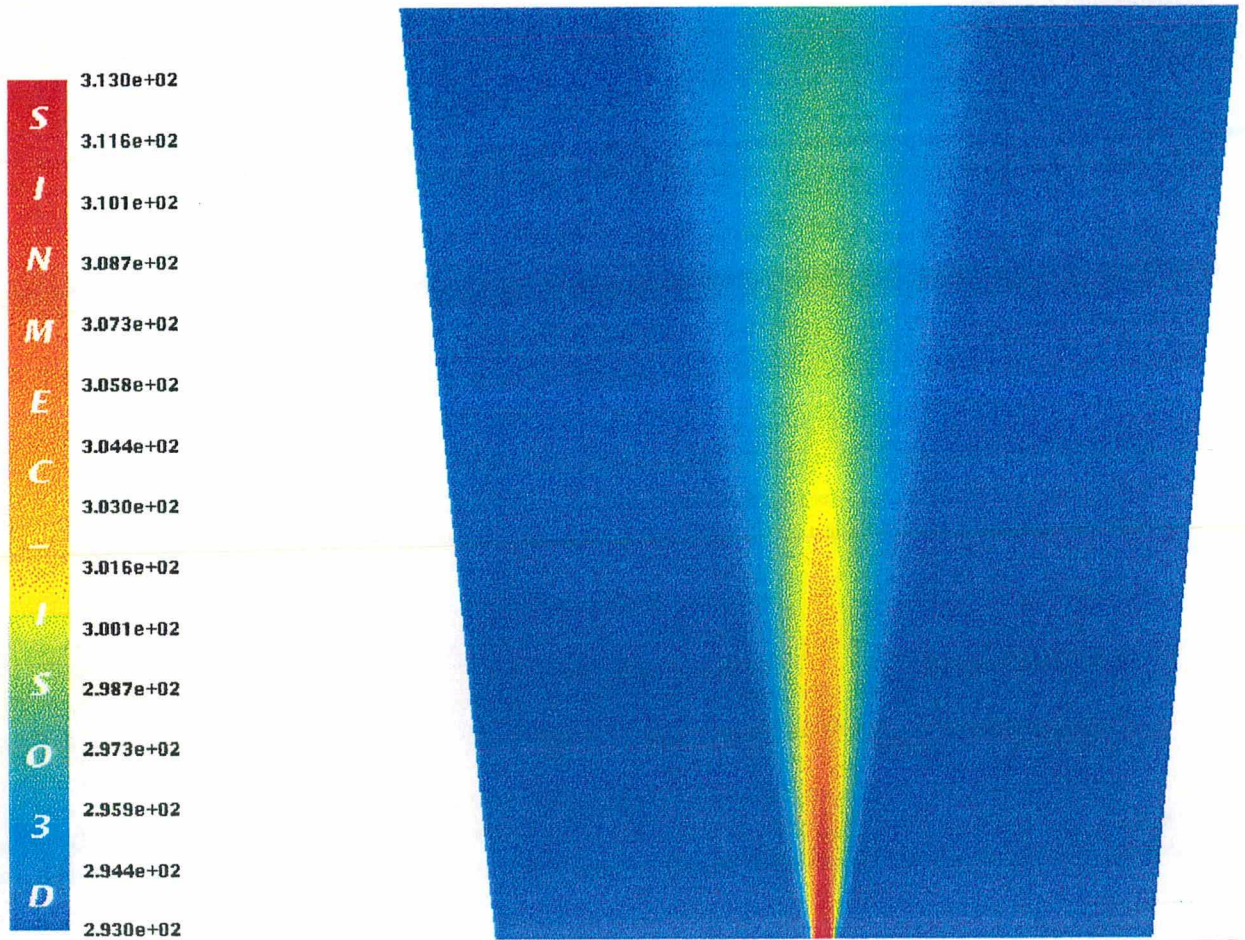


Figura 5.10 - Campo de temperatura para o caso da pluma forçada (K)

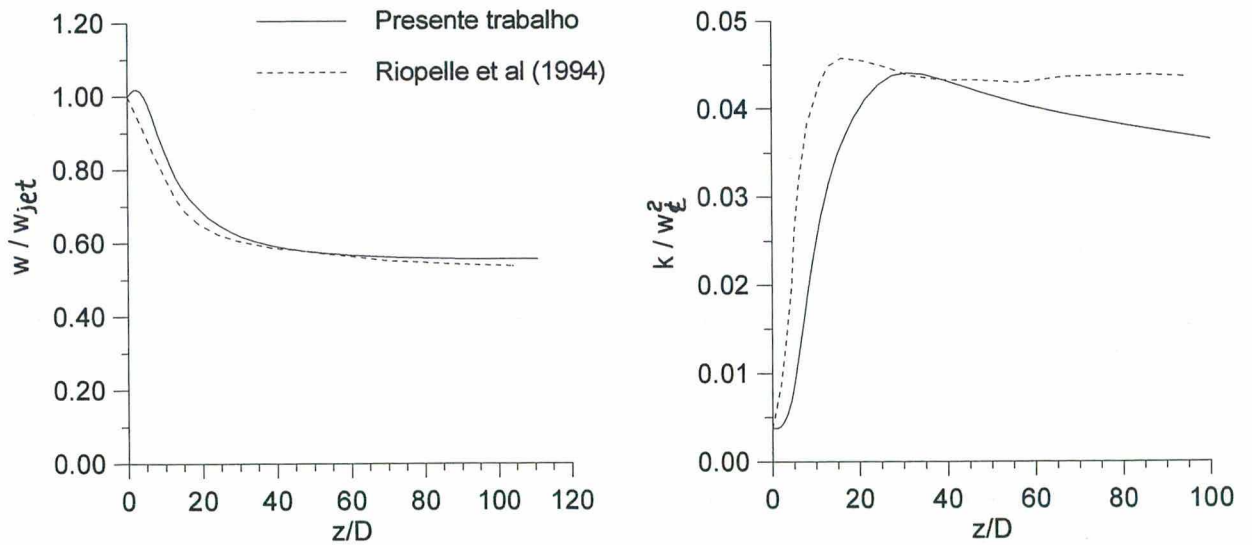


Figura 5.11 - Pluma forçada: decaimento da velocidade longitudinal (adimensionalizada pela velocidade de descarga) e energia cinética turbulenta no centro do jato (adimensionalizada pela velocidade na linha de centro)

5.3 - Escoamento Sobre Askervein

Askervein é uma montanha isolada com 116 m de altura (em relação ao terreno plano a sua volta) localizada no litoral da Escócia. Vista de cima, sua forma é oblonga com dimensões aproximadas de 1200 por 2000m. Sua secção transversal no sentido do eixo menor possui uma forma aproximadamente gaussiana. O terreno é coberto por pequenos arbustos e rochas planas, resultando numa rugosidade média do terreno $z_0 = 0.03\text{m}$. Diversos estudos experimentais acerca do escoamento sobre Askervein foram feitos, incluindo dois extensos estudos de campo em 1982 e 1983, conduzidos num esforço conjunto de laboratórios de pesquisa do Canadá, Dinamarca, Alemanha, Nova Zelândia e Reino Unido. Esses estudos foram reportados por Taylor e Teunissen (1983, 1985 e 1987). A montante o vento provem do oceano, percorrendo aproximadamente 3 km sobre terreno plano até encontrar a base da montanha.

5.3.1 - Descrição do Problema Simulado

Simulamos numericamente um caso de escoamento sobre Askervein, com direção de vento de 210° (em relação ao Norte geográfico), ou seja, soprando aproximadamente de sudoeste. A figura 5.12 mostra a topografia de Askervein, juntamente com as linhas da malha utilizada na simulação. As curvas de nível são espaçadas de 12 m e os valores referem-se à elevação acima da planície circundante. O domínio horizontal de cálculo forma um quadrado de 3 km de lado que envolve a montanha. Na vertical o domínio estende-se até a elevação de 690 m. A malha é alinhada com a direção do vento a montante, de forma que as fronteiras de entrada e saída são normais a esta direção. As duas outras fronteiras verticais são denominadas de laterais. A figura 5.13 mostra esquematicamente uma secção longitudinal do problema. À esquerda temos a fronteira de entrada, ou fronteira a montante. No caso simulado o escoamento é neutro (sem estratificação) e a velocidade do vento a montante (a 10 m do solo local) é de 10 m/s.

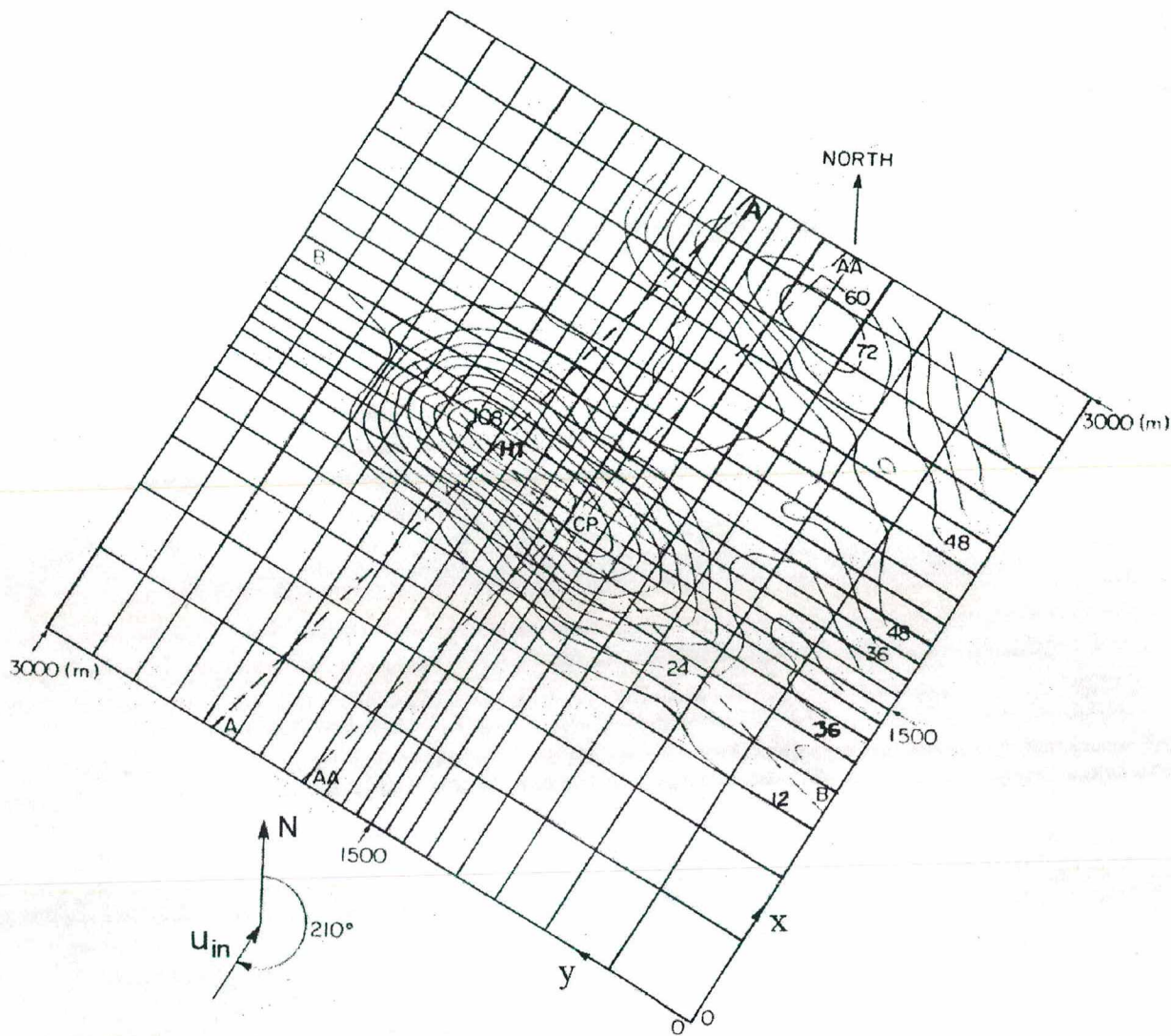


Figura 5.12 - Topografia de Askervein (e as linhas da malha utilizada)

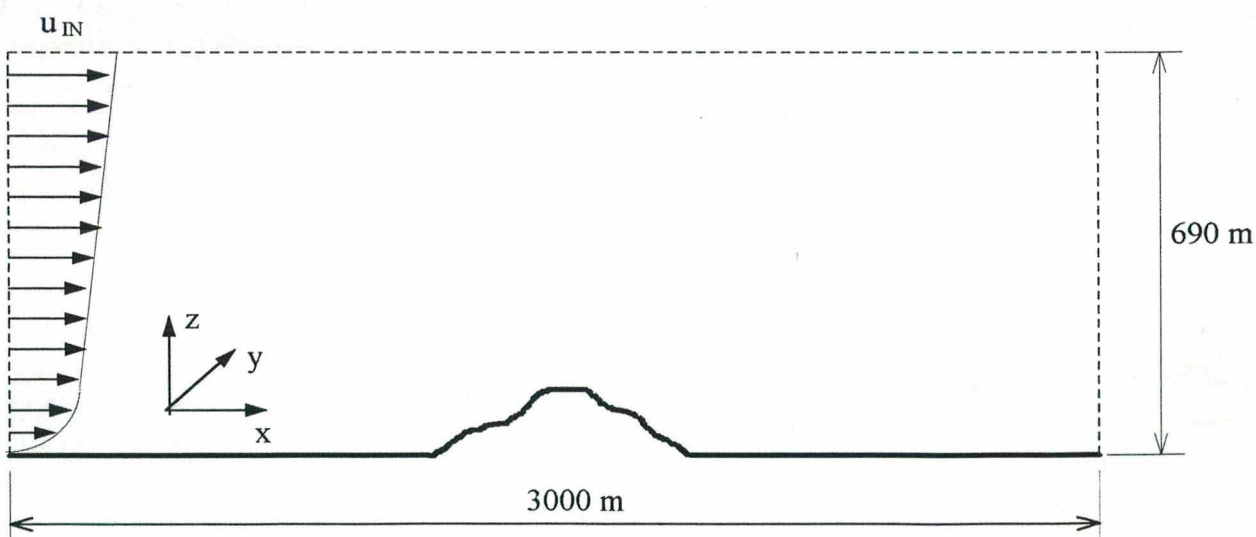


Figura 5.13 - Escoamento sobre Askervein - esquema da secção longitudinal do problema

5.3.2 - Equações Governantes

As equações que modelam o escoamento neutro na CLA são as de conservação da massa e de quantidade de movimento. Como a extensão horizontal do domínio é de 3 km, a força de Coriolis é desprezada. Segundo Orgil et al (1971), Snyder (1972) e Meroney (1990), para escoamentos na CLA até distâncias de 50 km o efeito de Coriolis pode ser desprezado. Como o escoamento é incompressível, as equações governantes resultam as mesmas do escoamento turbulento entre placas paralelas, ou seja, equações (5.1) e (5.2). A turbulência é modelada pelo k- ϵ , como feito por Raithby et al (1987), já que comparamos nossos resultados com os obtidos numericamente naquele trabalho. À exceção de $C_\mu = 0.033$, as constantes do modelo são aquelas do modelo clássico (seção 2.4.1, tabela 2.1). A razão dada por Raithby e seus colaboradores para adotar um valor de C_μ diferente já foi comentada na seção 2.4.1, quando recapitulamos o modelo k- ϵ isotrópico.

5.3.3 - Perfis de Velocidade e Turbulência na Entrada

Como o escoamento a montante de Askervein (para o caso estudado, 210°) provem de uma região plana suficientemente extensa, é adequado prescrever na entrada do domínio perfis de velocidade e turbulência do escoamento unidimensional plenamente desenvolvido na CLA. Nesta condição as componentes v e w da velocidade e os gradientes horizontais são nulos, com exceção do gradiente de pressão, que é, por assim dizer, a força motriz do escoamento. Tal situação é descrita pelas contrapartes unidimensionais (na direção z) da equação do movimento. Temos então uma equação para a componente u.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_t \frac{\partial u}{\partial z} \right) \quad (5.12)$$

Note que o gradiente de pressão é imposto de modo a resultar a velocidade desejada a uma certa altura do solo. No caso em estudo essa velocidade é de 10 m/s a 10 m do solo (velocidade de referência). Para o cálculo da viscosidade turbulenta são tomadas também as contrapartes unidimensionais das equações de k e ϵ . As condições de contorno no solo e na fronteira superior são as mesmas utilizadas para o escoamento tridimensional sobre a montanha, que são apresentadas na seção seguinte.

Uma forma análoga de se chegar a esses perfis característicos do escoamento unidimensional plenamente desenvolvido seria resolver o escoamento bidimensional entre placas planas paralelas (de rugosidade z_0) distanciadas de duas vezes a altura da CLA. Quando as camadas limites que se desenvolvem a partir das placas alcançarem seu tamanho máximo (igual a metade da distância entre as placas) o escoamento está plenamente desenvolvido e não teremos mais gradientes na direção do escoamento (exceto o de pressão), bem como a componente transversal da velocidade será nula. Os perfis de u , k e ε na saída serão os mesmos que se obtém quando se resolve as contrapartes unidimensionais (na direção transversal ao escoamento) das equações governantes. Utilizando-se esse procedimento deve-se tomar o cuidado de garantir que o comprimento das placas seja suficiente para que na saída o escoamento já tenha se desenvolvido completamente.

A figura 5.14 mostra os perfis de velocidade, energia cinética turbulenta e tensão cizalhante para o escoamento a montante de Askervein. As medições de campo foram feitas a 2.8 km a sul-sudoeste de CP (ver figura 5.12), entre 14:00 e 17:00 (horário inglês de verão) de 03-out-83. As adimensionalizações foram feitas da seguinte forma.

$$k^* = \frac{k}{V_R^2} \quad (5.13)$$

$$\tau_{13}^* = \frac{\tau_{13}}{\rho V_R^2} \quad (5.14)$$

$V_R = 10$ m/s é a velocidade de referência.

5.3.4 - Condições de Contorno

Na fronteira de entrada são prescritos os perfis de u , k e ε do escoamento unidimensional plenamente desenvolvido, que foi explicado na seção anterior. As velocidades v e

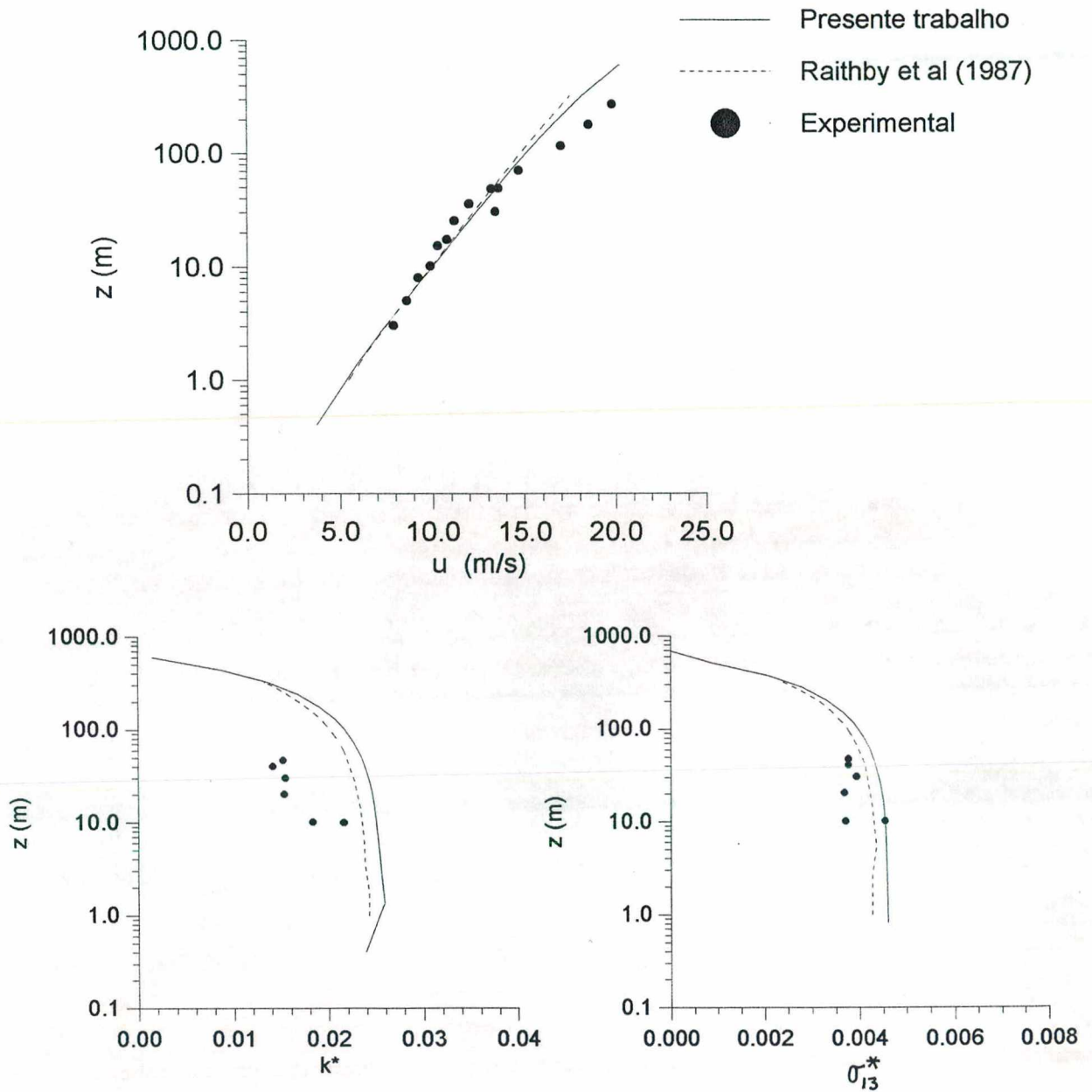


Figura 5.14 - Perfis medidos e calculados para o escoamento a montante de Askervein - velocidade (acima), energia cinética turbulenta (abaixo à esq.) e tensão cizalhante (abaixo à dir.)

w são nulas. Na fronteira de saída todos os fluxos difusivos são nulos. As fronteiras laterais e superior são consideradas paredes impermeáveis (velocidade normal nula) sem tensão cizalhante (condição de deslizamento puro). Os fluxos de k e ϵ também são nulos nessas fronteiras. A fronteira inferior (solo) é impermeável e a lei da parede (adaptada para escoamento na camada superficial atmosférica) é empregada para calcular a tensão cizalhante.

$$\frac{V_p}{u_*} = \frac{1}{k_v} \ln\left(\frac{h_p}{z_0}\right) \quad (5.15)$$

V_p é a componente da velocidade paralela à superfície nos volumes adjacentes a esta, h_p é a distância dos centros desses volumes ao solo. Raithby et al (1987), na simulação desse mesmo problema, utilizou a lei de parede clássica sugerida por Launder e Spalding (1974).

Para as variáveis turbulentas adotamos a mesma condição de contorno empregada por Raithby e seus colaboradores. O gradiente normal de k no solo é nulo e há equilíbrio local entre produção e dissipação de energia cinética turbulenta. ϵ é então prescrito nos volumes adjacentes à superfície (subscrito 'p') como

$$\epsilon_p = \frac{C_\mu^{3/4} k_p^{3/2}}{k_v h_p} \quad (5.16)$$

5.3.5 - Solução Numérica

A fim de comparar nossos resultados com aqueles obtidos por Raithby et al (1987), utilizamos uma malha muito semelhante àquela utilizada naquele trabalho. A figura 5.15 mostra uma secção vertical da malha, que possui 20 x 20 x 19 volumes, respectivamente, nas direções longitudinal, transversal e vertical. Na figura 5.12 tem-se uma vista superior da malha. As linhas γ da malha são verticais. A figura 5.16 mostra a topografia de Askervein tal como discretizada pela malha.

Assim como feito por Raithby e seus colaboradores, adotamos o esquema WUDS para avaliação dos fluxos nas faces dos volumes. Os demais detalhes da solução numérica são aqueles apresentados no capítulo 4. A figura 5.17 mostra o comportamento dos resíduos das variáveis (definidos na seção 4.11) ao longo das iterações na solução numérica.

5.3.6 - Resultados

As figuras 5.18 e 5.19 mostram uma secção vertical na direção longitudinal de Askervein, passando pelo topo da montanha (HT na figura 5.12), respectivamente com os vetores velocidade e as isolinhas de energia cinética turbulenta resultantes de nossa simulação. A figura

5.20 mostra a componente horizontal dos vetores velocidade a 10 m do solo. Na figura 5.21 comparamos nossos resultados numéricos com aqueles de Raithby et al (1987) e com dados experimentais. São mostrados os comportamentos da energia cinética turbulenta e do aumento relativo da velocidade a 10 m do solo, ao longo da linha A (figura 5.12). O aumento relativo da velocidade é definido como

$$\Delta S = \frac{V(z')}{V_{up}(z')} - 1 \quad (5.17)$$

onde V é o módulo da velocidade, z' é a altura a partir do solo e o subscrito 'up' significa na entrada do domínio (*upwind*). Na figura 5.22 são comparados os perfis verticais de energia cinética turbulenta e do aumento relativo de velocidade no topo de Askervein (ponto HT na figura 5.12).

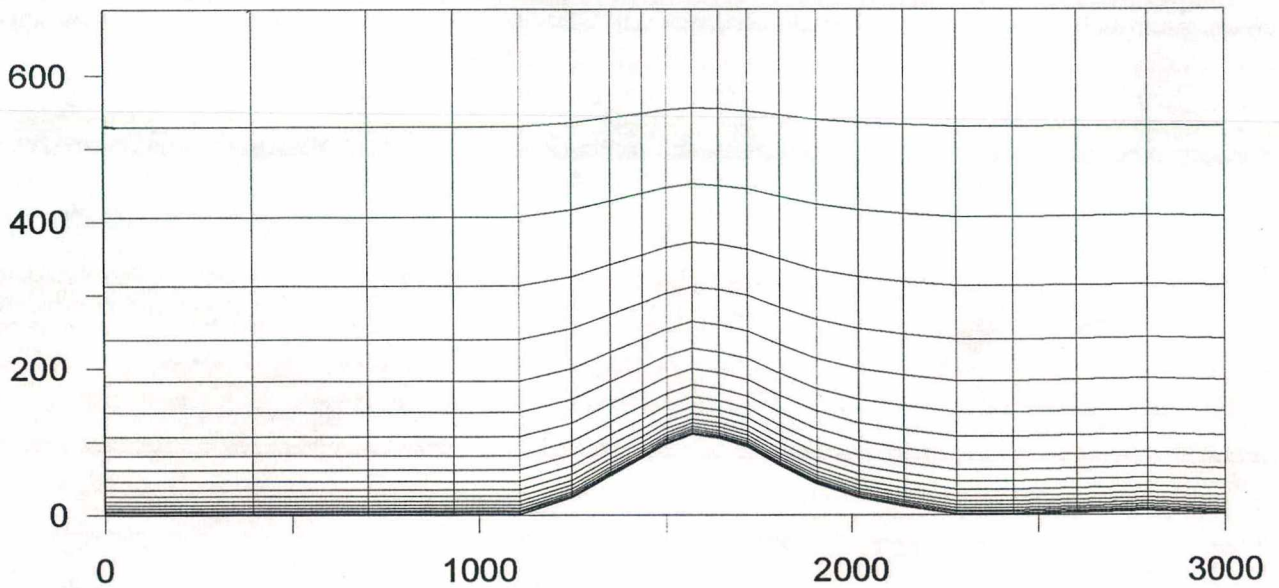


Figura 5.15 - Vista lateral da malha empregada para o caso Askervein - cotas em m (escala vertical exagerada)

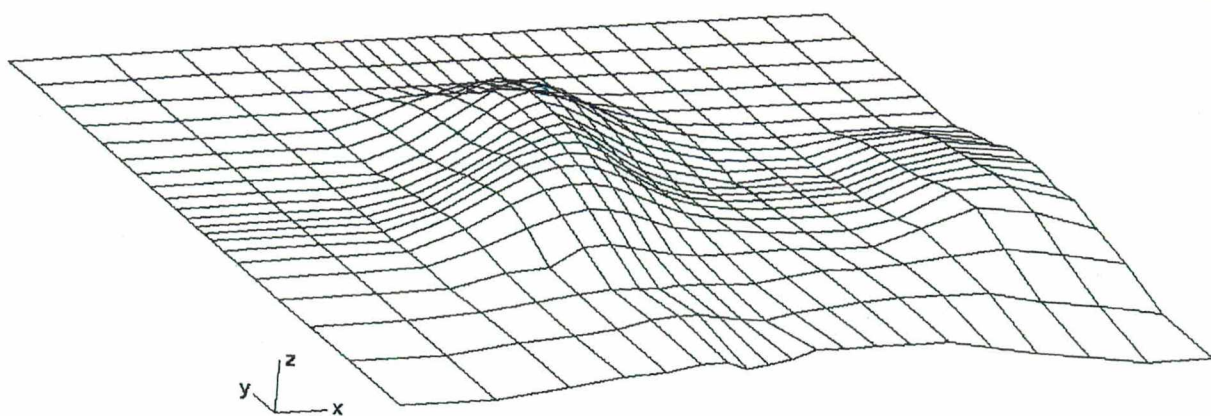


Figura 5.16 - Topografia de Askervein tal como discretizada pela malha

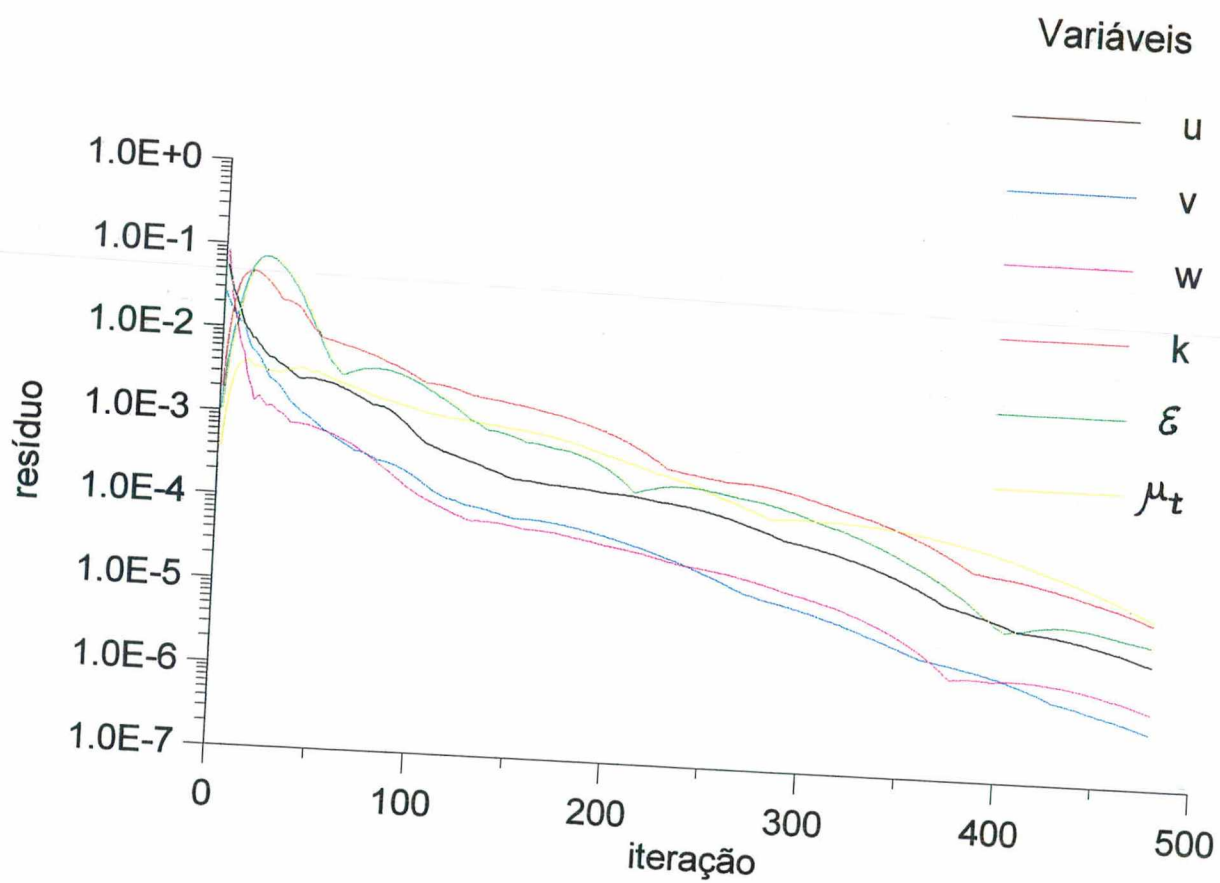


Figura 5.17 - Histórico dos resíduos na simulação de Askervein

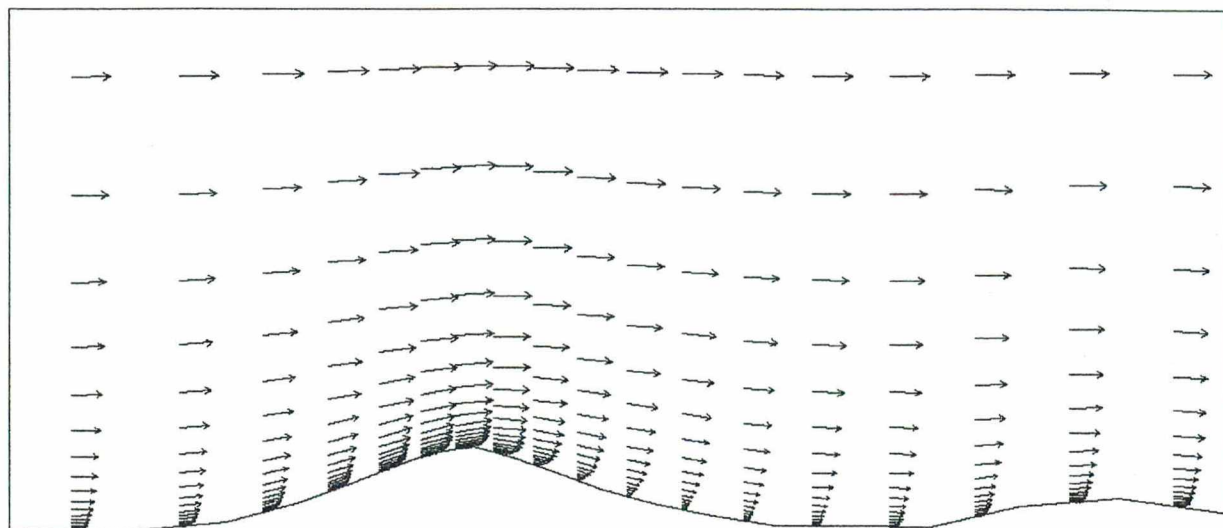


Figura 5.18 - Vetores velocidade em uma secção vertical de Askervein passando por HT
(dimensão vertical exagerada)

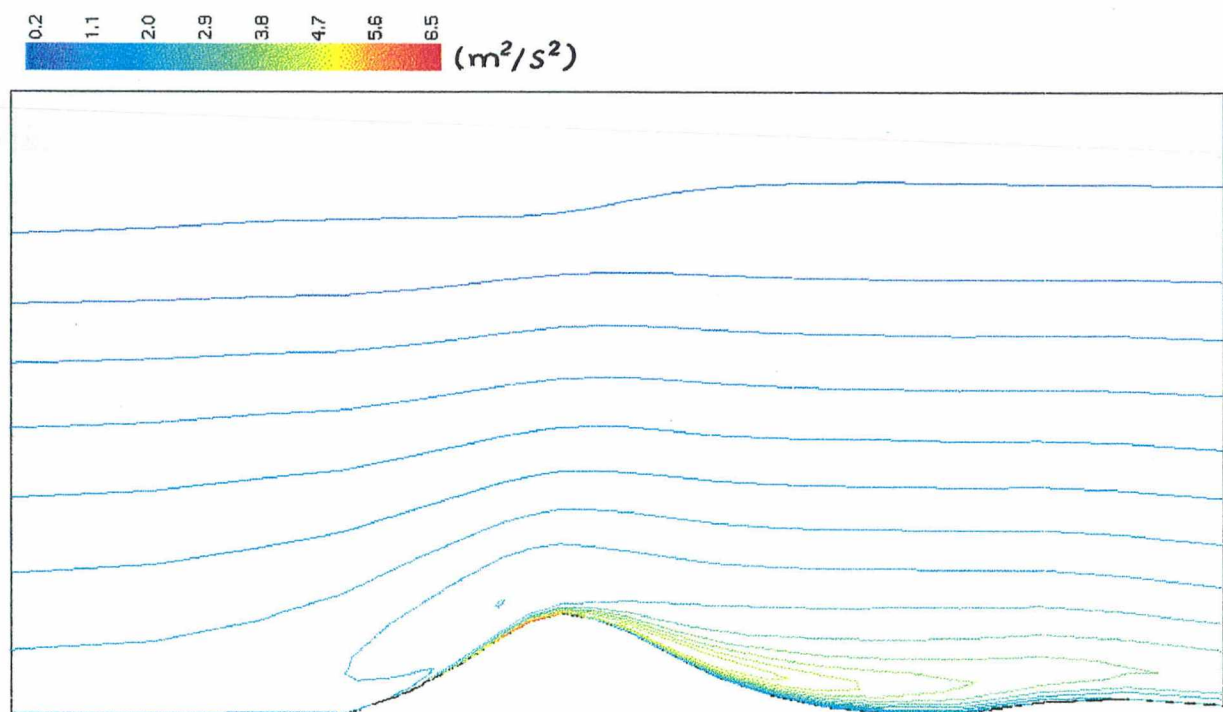


Figura 5.19 - Energia cinética turbulenta (m^2/s^2) em uma secção vertical de Askervein passando por HT (dimensão vertical exagerada)

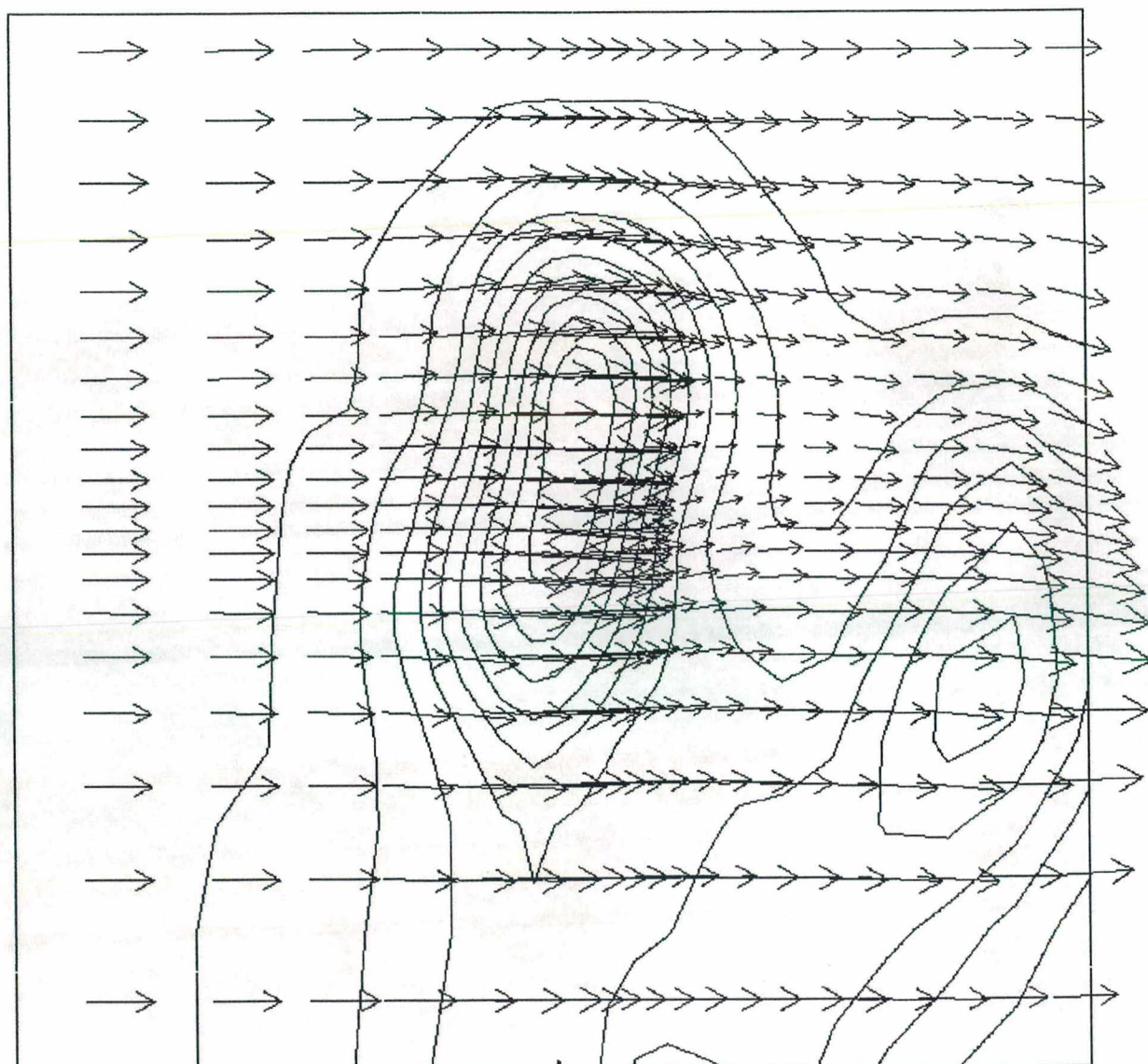


Figura 5.20 - Componente horizontal dos vetores velocidade a 10 m do solo

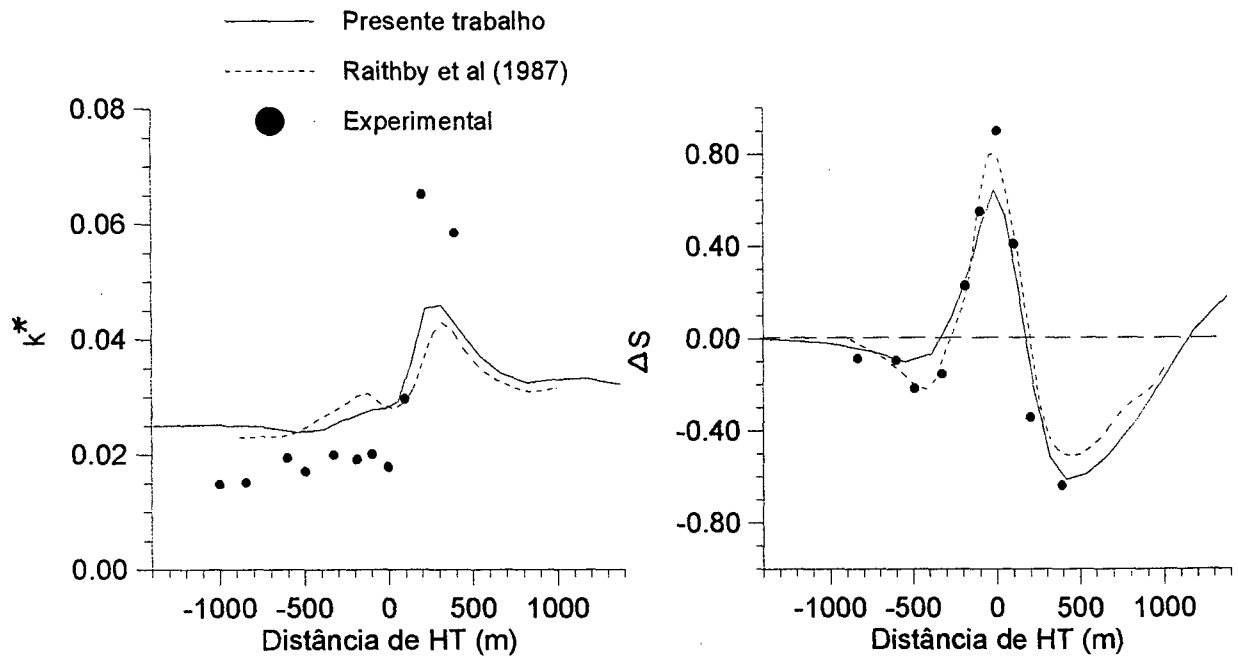


Figura 5.21 - Energia cinética turbulenta e aumento relativo da velocidade ao longo da linha A

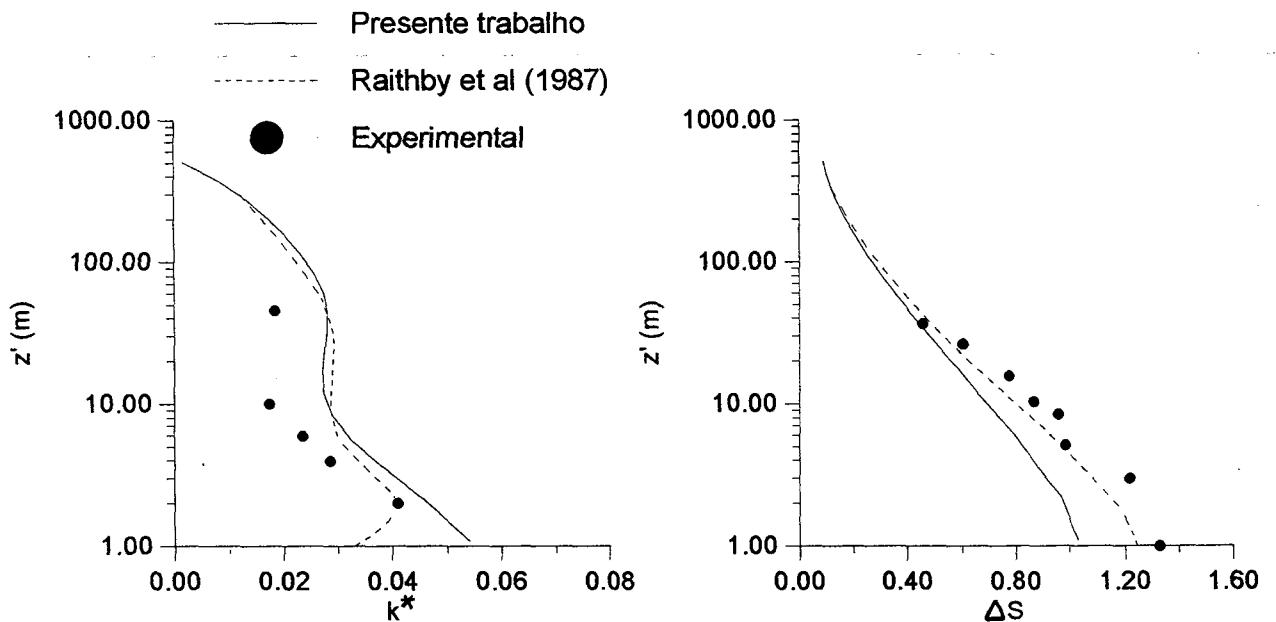


Figura 5.22 - Perfis verticais de k^* e ΔS no topo de Askervein

Embora as metodologias numéricas empregadas em nosso trabalho e naquele de Raithby e colaboradores sejam bastante semelhantes, há algumas diferenças que, ao menos parcialmente, explicam as diferenças entre os resultados numéricos. Os métodos numéricos diferem, basicamente, quanto ao arranjo das variáveis na malha, o processo iterativo de solução (Raithby

e colaboradores utilizaram o método de Hutchinson e Raithby, 1986) e ao critério de convergência. Outras possíveis causas de diferenças nas soluções numéricas são a topografia do terreno (obtivemo-la digitalizando e interpolando a partir de figura no artigo de Raithby) e a condição de contorno no solo (não empregamos a lei de parede clássica).

CAPÍTULO SEIS

DISPERSÃO EM TÚNEL DE VENTO

A nossa intenção desde o início deste trabalho é a de contribuir no sentido do desenvolvimento de uma metodologia numérica para prever a dispersão de poluentes na atmosfera, a qual possa ser aplicada a problemas reais de engenharia. Por isso tivemos a preocupação de propor um modelo matemático que tenha capacidade de levar em consideração vários fenômenos físicos importantes que interferem no problema real, entre os quais o caráter anisotrópico da turbulência (cap. 2 e 3). Depois, no que concerne à metodologia numérica de solução do modelo, estivemos atentos para utilizar malhas adequadas para o escoamento e para a concentração, bem como o cuidado de empregar um esquema de interpolação de alta ordem, para diminuir os efeitos da difusão numérica (cap. 4). Com relação à implementação do código computacional, foram feitas diversas simulações e comparações com outros resultados numéricos e experimentais em problemas testes, quando tivemos oportunidade de sanar erros no programa e encontrar procedimentos de sub-relaxação que evitam a divergência da solução (cap. 5). Neste capítulo, o modelo numérico é aplicado para simular um experimento de laboratório no qual um túnel de vento foi utilizado para estudar a dispersão de plumas na atmosfera, através de um problema tridimensional idealizado de terreno em escala reduzida. A comparação entre resultados numéricos e experimentais permite avaliar a performance do modelo matemático, através da identificação de suas qualidades e limitações. De fato, graças à considerável riqueza de medições providas do túnel de vento, pudemos identificar e propor uma solução para uma importante falha encontrada na modelagem da dispersão de um escalar no escoamento. Trata-se da superestimação da difusão da pluma na fase inicial de seu espalhamento. Essa questão será discutida ainda neste capítulo, na seção de resultados.

6.1 - Descrição do Experimento em Túnel de Vento

Em 1991 e 1992, como parte de um programa de estudos sobre dispersão na atmosfera, foram realizados experimentos no túnel de vento do Research Institute of Mitsubishi Heavy Industries, em Nagasaki - Japão. Os resultados das medições feitas foram reportados num relatório interno da empresa, datado de março de 1992. Uma cópia deste nos foi enviada diretamente pelo Sr. R. Ohba, integrante do grupo de pesquisadores que conduziram o experimento. A figura 6.1 mostra esquematicamente o túnel de vento utilizado. Ele é do tipo sucção, tem 1 m de altura por 2.5 m de largura e 19.5 m de comprimento. A seção de testes tem 10 m e é isolada termicamente com asbesto. O túnel tem uma seção de aquecimento na entrada (150 kW) e painéis de aquecimento e resfriamento no chão da seção de testes para produzir um escoamento estratificado. É possível resfriar o ar em até 20 K ou aquece-lo em até 80 K em relação à temperatura ambiente. O modelo do terreno é em alumínio, sob o qual foram colocados os dispositivos (*transistor thermo-modules*) para controlar a temperatura. A velocidade do vento é regulável desde 0.4 a 1.5 m/s e o perfil de temperatura vertical é ajustado através da mudança do ângulo de ataque de 10 aletas colocadas na saída dos tubos de aquecimento da seção de entrada. Um tubo fonte foi instalado a 5.6 m do início da placa de resfriamento (*cooling edge*, na figura 6.1), por onde é introduzido o gás traçador (metano). A temperatura foi medida com termopares e velocidade com anemômetro de fio quente ou com um medidor tipo “*photo-fiber LASER doppler*”. O traçador foi analisado por cromatografia a gás.

Foram realizados experimentos de dispersão em escoamentos neutros e estavelmente estratificados sobre três configurações de terreno: plano, montanha de 100 mm e montanha de 200 mm de altura máxima. O modelo da montanha é axisimétrico e a sua superfície é descrita por

$$z_t(r) = \frac{h}{1 + (r/200)^4} \quad (6.1)$$

onde z_t é a altura da topografia, h é a altura máxima (no centro da montanha) e r a distância horizontal a partir do centro. O sistema coordenado utilizado tem sua origem no centro da montanha. A figura 6.2 mostra os perfis dos modelos de montanhas utilizados.

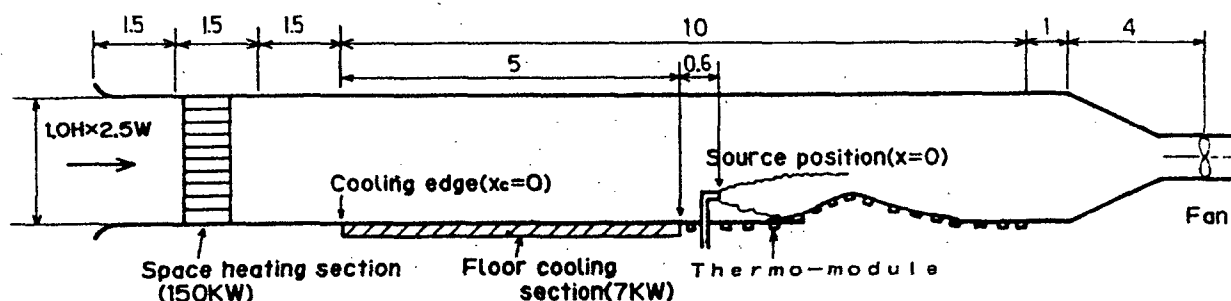


Figura 6.1 - Vista esquemática do túnel de vento termicamente estratificado

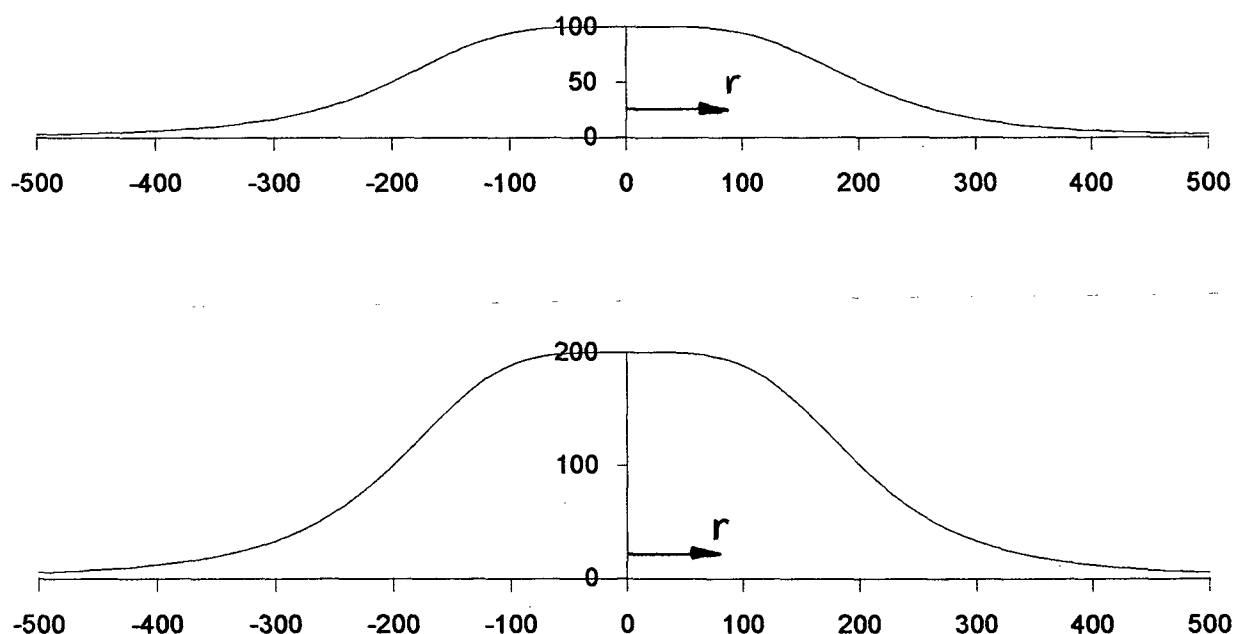


Figura 6.2 - Perfis de terrenos utilizados no túnel de vento

($h=100$ acima, $h=200$ abaixo, valores em mm)

Com relação aos resultados experimentais reportados pelo instituto de pesquisas da Mitsubishi Heavy Industries, não há informações sobre a banda de erro associada às incertezas de medição.

6.2 - Descrição dos Problemas Simulados

Simulamos 6 casos de dispersão em túnel de vento, sendo 3 em atmosfera neutra (classe D) e 3 em atmosfera estável (classe E). Dentro de cada classe de estabilidade foram consideradas 3 topografias distintas: plana, montanha baixa ($h = 100$ mm) e montanha alta ($h = 200$ mm). A designação de cada caso é feita por uma letra, que indica a classe de estabilidade, seguida de um algarismo, que é a altura da montanha em dm. A tabela 6.1 apresenta os casos estudados e suas características. A velocidade U_∞ é uma velocidade de referência, que é aproximadamente a velocidade medida no escoamento fora da camada limite, e ΔT é a diferença entre a temperatura do solo (T_0) e do escoamento fora da camada limite (T_∞).

CASO	ESTABILIDADE	h (mm)	U_∞ (m/s)	ΔT (°C)	z_s (mm)
D0	D	0	1.0	0	50
D1	D	100	1.0	0	50
D2	D	200	1.0	0	100
E0	E	0	1.0	20	50
E1	E	100	1.0	20	50
E2	E	200	1.0	20	100

Tabela 6.1 - Quadro resumo dos casos estudados

A figura 6.3 mostra esquematicamente o domínio de cálculo dos problemas simulados. As cotas são dadas em mm e quando há dois valores, o primeiro refere-se aos casos planos e o segundo aos casos com montanha. A direção x é alinhada com o escoamento, y é a direção transversal e z a vertical. A origem do sistema coordenado está no centro da montanha (ponto de altura máxima). A fonte está posicionada 500 mm a montante da montanha e a z_s mm do solo ($x = -500$, $y = 0$, $z = z_s$). O orifício de descarga foi discretizado como de secção quadrada de 1 e 2 mm de lado, respectivamente, em malha refinada e grosseira. Como o problema é simétrico em relação ao plano $y=0$, apenas uma metade ($y > 0$) do problema real foi simulada.

Convém dizer que as dimensões do domínio de cálculo mostradas na figura 6.3 são aquelas adotadas para a simulação do escoamento. Para a solução da concentração uma malha diferente é empregada. Esta possui dimensões menores (porque a partir de certas distâncias a concentração é nula e não é necessário estender mais a malha) e distribuição de volumes adequada para captar os gradientes de concentração (ver seção 4.15). A malha para a concentração estende-se de $x=-500$ a $x=2200$ para terreno plano, e $x=-500$ a $x=1500$ para os casos com montanha. Nas direções transversal e vertical a malha estende-se de 0 a 500 mm (para y e z).

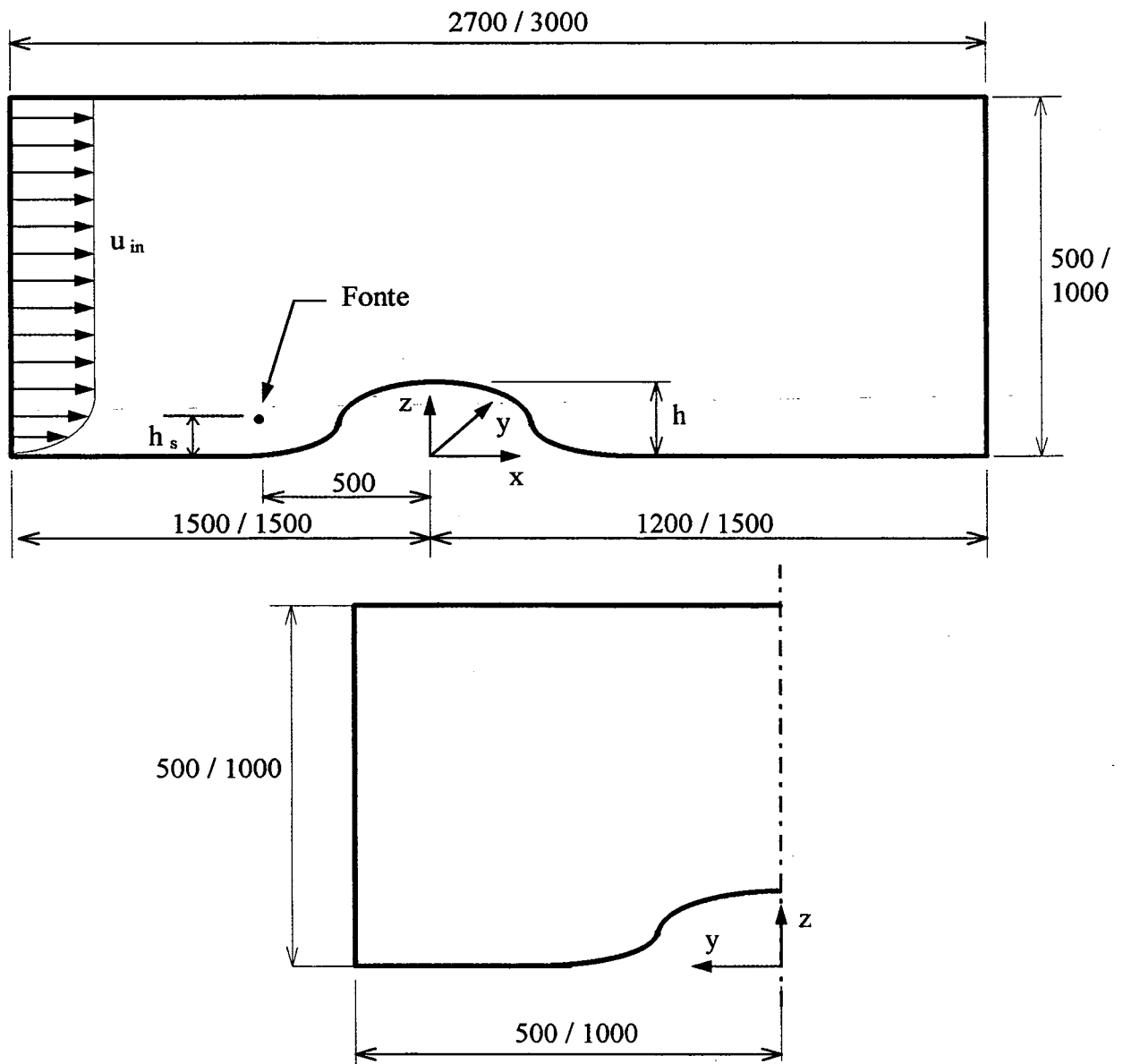


Figura 6.3 - Esquema do problema de dispersão em túnel de vento
Vista longitudinal (acima) e transversal (abaixo)
(cotas em mm)

6.3 - Equações Governantes

O capítulo 2 foi dedicado à apresentação do modelo matemático e à discussão acerca das equações governantes e das hipóteses sob as quais estão baseadas as suas deduções. Nominalmente, conservação da massa, quantidade de movimento, energia e transporte de um escalar (concentração) são, respectivamente

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (6.2)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(p + \frac{2}{3} \rho k \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[K_m^j \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{\tilde{\rho}}{\rho} g \delta_{i3} \quad (6.3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K_h^j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \quad (6.4)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_j \frac{\partial c}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K_h^j \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) \quad (6.5)$$

A temperatura aqui considerada é a própria temperatura termodinâmica - não a temperatura potencial - já que o problema ora em questão é o da simulação do escoamento na camada limite atmosférica em modelo reduzido (túnel de vento). Este fato, entretanto, só tem significado conceitual, já que no espaço de 1 m (que é a altura do túnel de vento) as temperaturas potencial e termodinâmica se confundem. Como não há reações químicas presentes ou remoção por deposição úmida, o termo fonte da concentração é nulo. O modelo k-ε anisotrópico (seção 2.4.2) é utilizado para a determinação dos coeficientes de transporte turbulentos. As equações de transporte de k e ε são, respectivamente, (2.74) e (2.75). As constantes do modelo são aquelas da tabela 2.1 (as mesmas do modelo k-ε clássico). Os números de Prandtl e Schmidt turbulentos são iguais a 0.5 .

6.4 - Condições de Contorno

Separamos a especificação das condições de contorno nas seções seguintes, agrupando as fronteiras do domínio conforme os diferentes tipos de condições aplicadas.

6.4.1 - Fronteira a Montante

A fronteira a montante é de entrada de massa no domínio. Assim, é necessário que os fluxos convectivos sejam prescritos nessa fronteira e os difusivos sejam nulos (fisicamente coerente). As condições do escoamento na fronteira de entrada são as que mais influenciam a solução do problema. Velocidade do vento, perfil de estratificação e intensidade da turbulência são essencialmente convectados escoamento adentro e determinam a dispersão da pluma a montante da montanha. Ao passar sobre a montanha o escoamento sofre modificações consideráveis provocadas pela topografia. Assim, sobre a montanha e a jusante desta, as condições de contorno na entrada não são decisivas sobre o comportamento do escoamento (exceto a alturas maiores, distantes do solo). No entanto, com relação ao comportamento da pluma, sua dispersão inicial, quando ainda está a montante da montanha, é fortemente ditada pelas condições de contorno na entrada.

No túnel de vento foram medidos alguns perfis verticais da velocidade longitudinal, temperatura e intensidade turbulenta em diversas posições ao longo da direção do escoamento. Tomamos os valores experimentais de velocidade e temperatura para serem prescritos como condição de contorno na fronteira a montante. A partir dos valores experimentais de intensidade das flutuações das componentes da velocidade calculamos a energia cinética turbulenta para ser também prescrita na entrada. A intensidade das flutuações de velocidade foram reportadas da seguinte forma.

$$\Delta u_i = \frac{\sqrt{u_i'^2}}{u} \quad (6.6)$$

A adimensionalização é feita pela componente longitudinal da velocidade (u). A energia cinética turbulenta é então calculada por

$$k = \frac{\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}}{2} = \frac{u^2}{2} \left[(\Delta u)^2 + (\Delta v)^2 + (\Delta w)^2 \right] \quad (6.7)$$

Como os pontos da malha não coincidem necessariamente com os pontos de medição no experimento (na direção vertical), interpolamos linearmente a partir dos dois pontos experimentais mais próximos. A figura 6.4 mostra os perfis verticais de velocidade (u_{in}), temperatura (T_{in}) e energia cinética turbulenta (k_{in}) prescritos na fronteira de entrada. Como a malha está alinhada com o escoamento na entrada, temos $v_{in} = w_{in} = 0$.

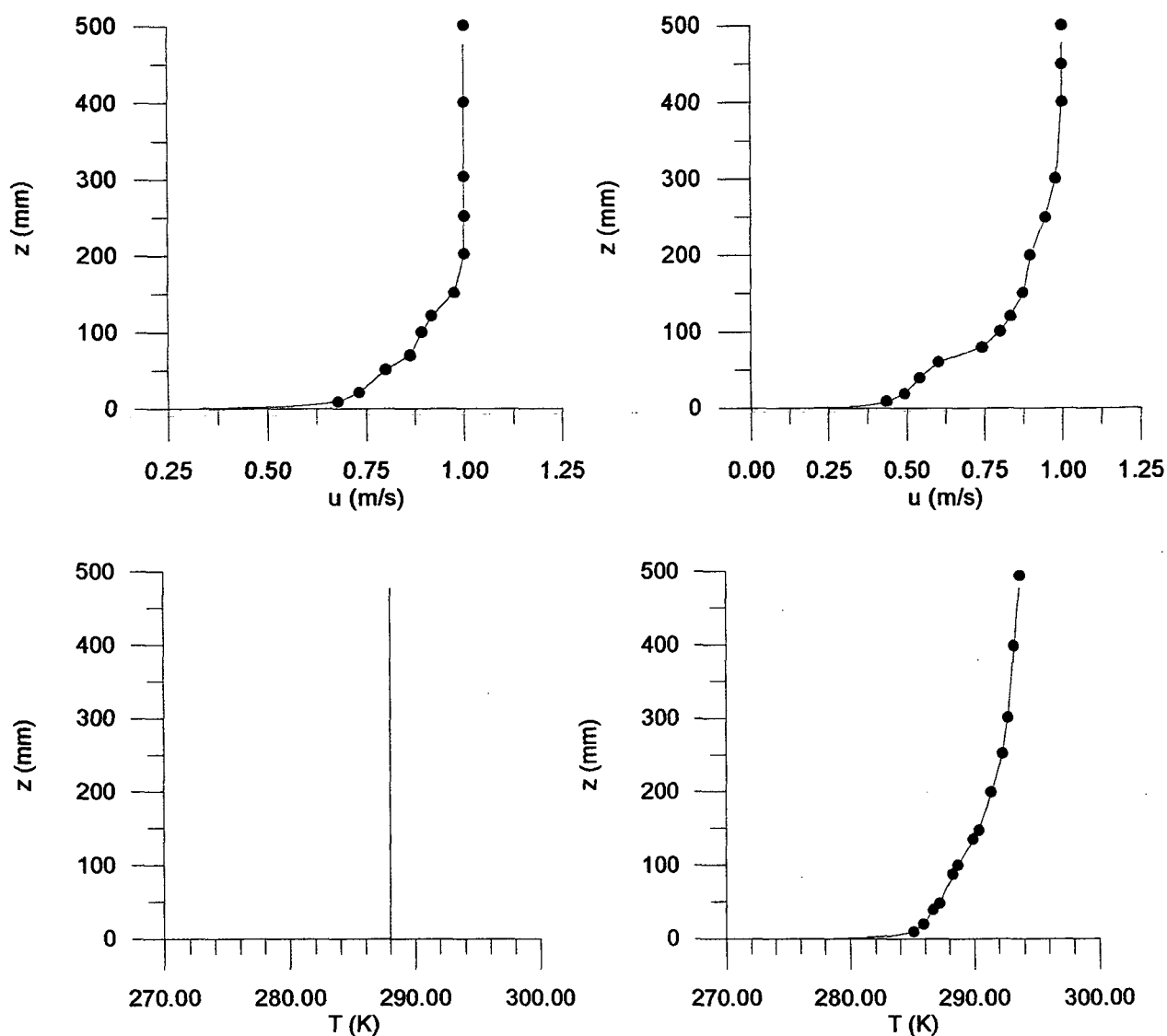


Figura 6.4 - Perfis de velocidade, temperatura e energia cinética turbulenta na entrada (casos neutros a esq. e estáveis a dir.)

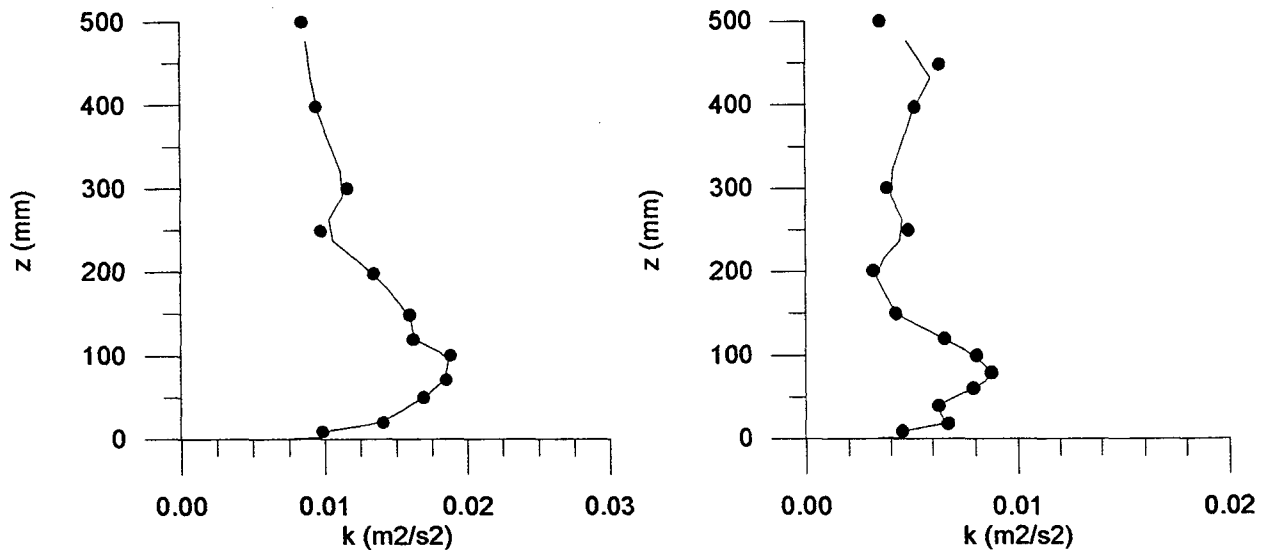


Figura 6.4 - Perfis de velocidade, temperatura e energia cinética turbulenta na entrada (casos neutros a esq. e estáveis a dir.) - continuação

Como não foram feitas medições da taxa de dissipação (ϵ), prescrevemos o seu perfil na entrada em função do comprimento de escala da turbulência (ou comprimento de mistura). Para os casos neutros (D) empregamos a relação usualmente utilizada para a camada limite atmosférica.

$$l_{in} = k_v z \quad (6.8)$$

Para os casos estavelmente estratificados (E), o comprimento de escala não cresce sempre linearmente com a altura, mas é limitado a um valor máximo pelo caráter estável do escoamento. A idéia é então escrever o comprimento de escala como

$$l = \left(\frac{1}{k_v z} + \frac{1}{l_{max}} \right)^{-1} = \frac{k_v z}{1 + \frac{k_v z}{l_{max}}} \quad (6.9)$$

Na CLA estável é o comprimento de Monin-Obukhov (L , ver seção 3.5) que determina o tamanho dos maiores vórtices (Apsley, 1995). De acordo com a teoria da similaridade de Monin-Obukhov para a camada superficial, a viscosidade turbulenta é dada por

$$v_t = \frac{k_v u_* z}{\phi_m} \quad (6.10)$$

onde ϕ_m é uma função de z e L (ver seção 3.6). A escala de velocidade é u_* (comparar 6.10 com 2.47) e então o comprimento de escala da turbulência é (tomando ϕ_m para condições estáveis dado por 3.11)

$$l = \frac{k_v z}{1 + \frac{4.7z}{L}} \quad (6.11)$$

Comparando (6.11) com (6.9) obtemos o comprimento de escala máximo.

$$l_{max} = \frac{k_v L}{4.7} = 0.085L \quad (6.12)$$

Substituindo (6.12) em (6.9) obtemos uma expressão para o comprimento de escala na entrada do escoamento.

$$l = \frac{k_v z}{1 + \frac{k_v z}{0.085L}} \quad (6.13)$$

O comprimento de Monin-Obukhov é obtido a partir dos perfis de velocidade e temperatura medidos, empregando-se as expressões para velocidade e temperatura na camada superficial. A partir de 3.12 e 3.17 (utilizando 3.2 e 3.18) temos

$$u_1 = \frac{u_*}{k_v} \left[\ln \left(\frac{z_1}{z_0} \right) + 4.7 \frac{z_1}{L} \right] \quad (6.14)$$

$$\Delta\theta = \theta_2 - \theta_1 = \frac{u_*}{k_v^2 g \beta L} \left[\ln \left(\frac{z_2}{z_1} \right) + 4.7 \frac{(z_2 - z_1)}{L} \right] \quad (6.15)$$

Eliminando u_* chega-se a

$$\frac{u_1^2}{\Delta\theta} = \frac{g\beta L \left[\ln\left(\frac{z_1}{z_0}\right) + 4.7 \frac{z_1}{L} \right]^2}{\left[\ln\left(\frac{z_2}{z_1}\right) + 4.7 \frac{(z_2 - z_1)}{L} \right]} \quad (6.16)$$

a qual é resolvida (numericamente) para determinar L . Tomamos a média de L calculado a partir dos valores de u e T dos três pontos mais próximos do solo, o que resultou em $L = 0.13$ m para os casos estáveis (E). A figura 6.5 mostra o perfil de l na entrada para os casos estáveis (E).

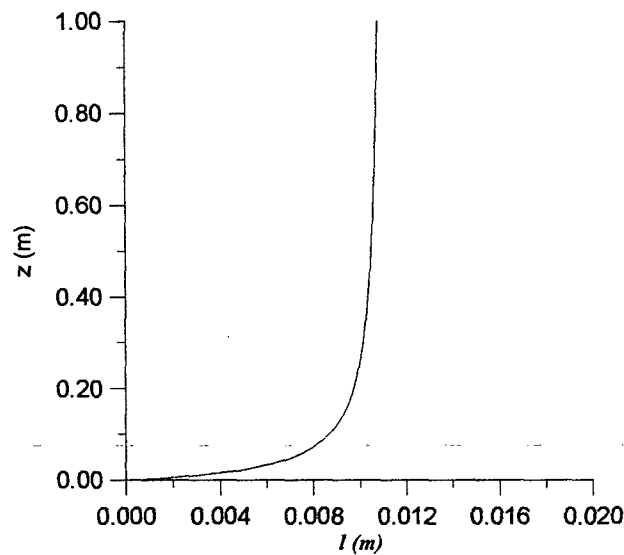


Figura 6.5 - Perfil do comprimento de escala da turbulência na entrada - casos estáveis (E)

A malha para a concentração inicia-se na posição em que está a fonte ($x = -500$ mm). Assim, a concentração é prescrita como $c_{in} = 1$ (g/m^3) nas faces dos volumes que representam a fonte e $c_{in} = 0$ no restante da fronteira.

6.4.2 - Fronteira Inferior

A fronteira inferior é o solo, neste caso, o chão do túnel de vento com o modelo do terreno. A lei logarítmica de parede é empregada para a determinação dos fluxos difusivos turbulentos de quantidade de movimento e de calor trocados com o solo. Este é impermeável, implicando em fluxos convectivos nulos (velocidade normal nula junto à superfície). As funções de parede para a velocidade e a temperatura são as seguintes (Launder e Spalding, 1974).

$$\frac{V_p}{u_*} = \frac{1}{k_v} \ln \left(\frac{E h_p u_*}{\nu} \right) \quad (6.17)$$

onde V_p é a componente da velocidade paralela à superfície nos volumes adjacentes a esta, h_p é a distância desses volumes à superfície, $E = 26$ (parede lisa).

$$\frac{T_p - T_0}{T_*} = \frac{Pr_t}{k_v} \ln \left(\frac{F h_p u_*}{\nu} \right) \quad (6.18)$$

onde T_* é o fluxo de calor dado por (3.18), T_0 é a temperatura do solo, $F = 38.6$ (ar escoando sobre parede lisa e $Pr_t = 0.5$).

As expressões (6.17) e (6.18) relacionam a tensão cizalhante e o fluxo de calor na parede, respectivamente, com a velocidade e a temperatura na região (ainda turbulenta) próxima à parede, onde seus comportamentos são muito bem descritos por perfis logarítmicos de variação.

Energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação são prescritas nos volumes adjacentes ao solo assumindo-se equilíbrio local entre produção e dissipação. Este é geralmente o procedimento que se adota para escoamento turbulento junto a parede sólida, na ausência de melhores condições de contorno. De fato, os termos de transporte (convectivo e difusivo) de k e ε próximo à parede são muito pequenos quando comparados com os termos de produção e dissipação, como demonstrado por Koo (1993). Como nosso estudo inclui escoamentos estratificados, optamos por incluir o termo de produção (ou destruição) por efeito de empuxo (G) nos balanços que determinam os valores de k e ε nos volumes junto ao solo. Desta forma, considerando $P + G = \varepsilon$ e utilizando os resultados da teoria de Monin-Obukhov obtemos

$$k_p = C_m^{-1/2} u_*^2 \left(1 + \frac{h_p}{\phi_m L} \right) \quad (6.19)$$

$$\varepsilon_p = \frac{u_*^3}{k_v} \left(\frac{\phi_m}{h_p} - \frac{1}{L} \right) \quad (6.20)$$

ϕ_m é dado pela equação 3.11 . Note que para a condição de estabilidade neutra ($L=\infty$ e $\phi_m=1$) as expressões acima reduzem-se àquelas clássicas normalmente encontradas na literatura.

No caso da concentração, é considerado que o solo não absorve o gás traçador, ou seja, não há fluxo de poluente para a fronteira inferior.

$$\frac{\partial c}{\partial n} = 0 \quad (6.21)$$

6.4.3 - Fronteiras Laterais e Superior

As fronteiras laterais e superior são, respectivamente, as paredes laterais e o teto do túnel de vento. Como não nos interessa resolver as camadas limites adjacentes a elas, as mesmas são tratadas como paredes impermeáveis e adiabáticas sobre as quais o escoamento desliza sem atrito (“parede deslizante”). Desta forma, a condição de contorno para a velocidade é de tensão cizalhante e velocidade normal nulas. Para a temperatura, as variáveis turbulentas (k e ε) e a concentração, a condição é a de fluxo nulo através dessas fronteiras. Assim temos para as fronteiras laterais

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0 \quad (\phi = u, w, T, k, \varepsilon, c) \quad e \quad v = 0 \quad (6.22)$$

E para a fronteira superior

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0 \quad (\phi = u, v, T, k, \varepsilon, c) \quad e \quad w = 0 \quad (6.23)$$

6.4.4 - Fronteira a Jusante

A fronteira a jusante é aquela por onde o escoamento deixa o domínio do problema. Adotamos a condição de contorno típica para fronteira com saída de massa, que é a de gradiente longitudinal nulo para todas as variáveis.

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (\phi = u, v, w, T, k, \varepsilon, c) \quad (6.24)$$

6.5 - Solução Numérica

As características da metodologia numérica já foram apresentadas no capítulo 4. Nesta seção são comentadas algumas particularidades da solução numérica dos casos de túnel de vento estudados. Como foi a partir desses casos que decidimos implementar o esquema QUICK, dedicamos uma subseção para comparar as diferenças entre os resultados obtidos com o WUDS e com o QUICK. Nesta seção é apresentada uma série de resultados (numéricos e também experimentais) não com a finalidade de comentar a performance do modelo, mas sim com a intenção de analisar a influência de fatores da metodologia numérica (como as malhas e os esquemas de interpolação) e de avaliar a precisão da solução.

6.5.1 - Malhas Empregadas

Como discutido na seção 4.15, utilizamos malhas distintas para resolver o escoamento e a concentração, cada qual com uma distribuição de volumes mais adequada para captar os gradientes característicos de cada problema. Tanto para o escoamento quanto para a concentração foram obtidas soluções em três malhas (com diferentes graus de refino): grosseira, intermediária e fina. A tabela 6.2 mostra os números de volumes das malhas utilizadas. O fator 1.5 foi utilizado no aumento do número de volumes em cada direção ao passar-se de malha grosseira para intermediária e de intermediária para fina. Assim, as malhas finas possuem 2.25 vezes mais volumes em cada direção do que as malhas grosseiras correspondentes. O estudo quantitativo do refino de malha procedido será apresentado numa subseção mais adiante. Como o programa SMOKE (solução da concentração) utiliza muito menos memória e necessita de menos tempo de processamento que o NAVIER (solução do escoamento), é possível empregar malhas muito mais refinadas para resolver a concentração do que aquelas utilizadas para o escoamento (ver tabela 6.2).

	Escoamento		Concentração	
	NX x NY x NZ	Total de volumes	NX x NY x NZ	Total de volumes
Grosseira	42x18x18	13608	64x32x32	65536
Intermediária	63x27x27	45927	96x48x48	221184
Fina	95x41x41	159695	128x64x64	524288

Tabela 6.2 - Número de volumes das malhas

A figura 6.6 mostra a malha grosseira utilizada na solução do escoamento para os casos D2 e E2. Na direção longitudinal, a montante e a jusante da montanha, a malha varia segundo uma progressão geométrica (PG). Sobre a montanha ela é igualmente espaçada. Distribuição semelhante ocorre na direção transversal. Na direção vertical a malha varia segundo uma PG. Na figura 6.7 tem-se uma visão da topografia da montanha alta (200 mm , meio-domínio), tal como discretizado pela malha fina do escoamento.

A figura 6.8 mostra a malha grosseira utilizada na solução da concentração para os casos D2 e E2. A malha é mais refinada junto à fonte (à esquerda) e depois junto ao solo, onde estão os maiores gradientes a captar.

Utilizamos estações de trabalho Sun SPARK 10 (SINMEC-UFSC) e Ultra 1 (DEMEC-UFPR) e o IBM-SP2 (NPD-UFSC). Os casos em malha intermediária e fina (e alguns em malha grosseira) foram rodados nos nós (CPU's) largos do SP2. Os programas requerem aproximadamente 25 MB e 240 MB de memória RAM, respectivamente para malha grosseira e fina. O tempo de processamento (no IBM-SP2) para o escoamento é de 20 a 30 minutos e 6 a 8 horas, respectivamente para malha grosseira e fina. Para a concentração os tempos são de 2 a 4 minutos (malha grosseira) e 2.5 a 4 horas (malha fina).

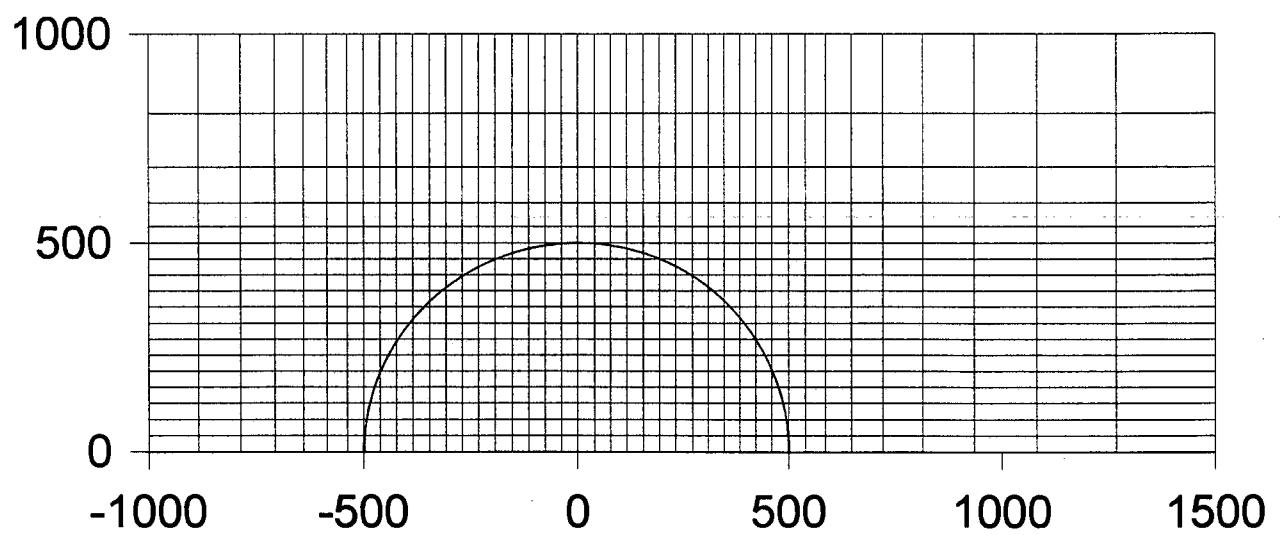
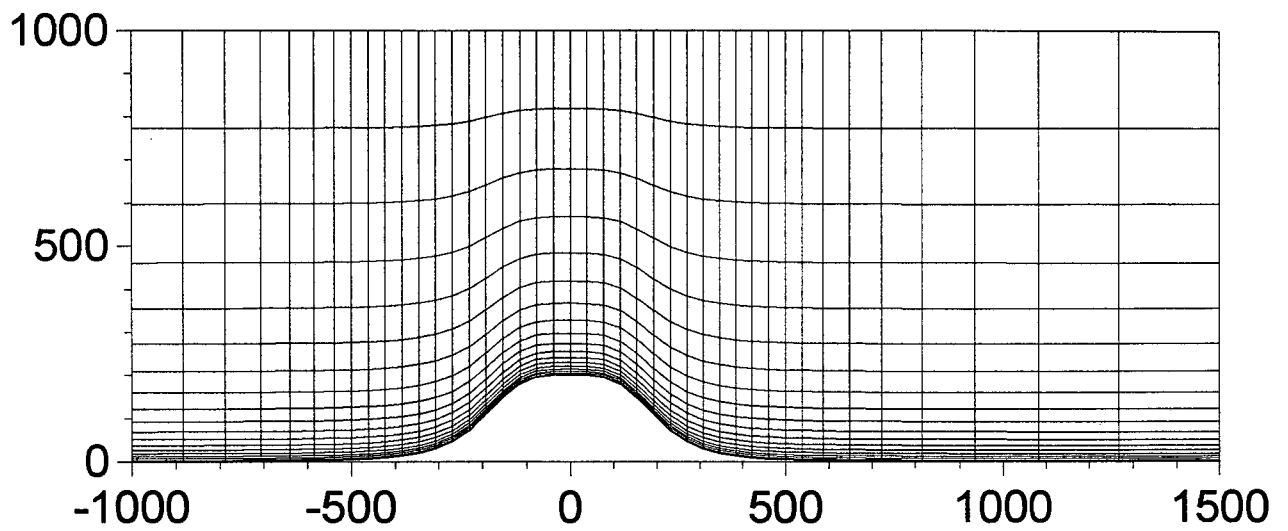


Figura 6.6 - Malha grosseira para o escoamento (casos D2 e E2)
Vista lateral (acima) e vista superior (abaixo) - cotas em mm

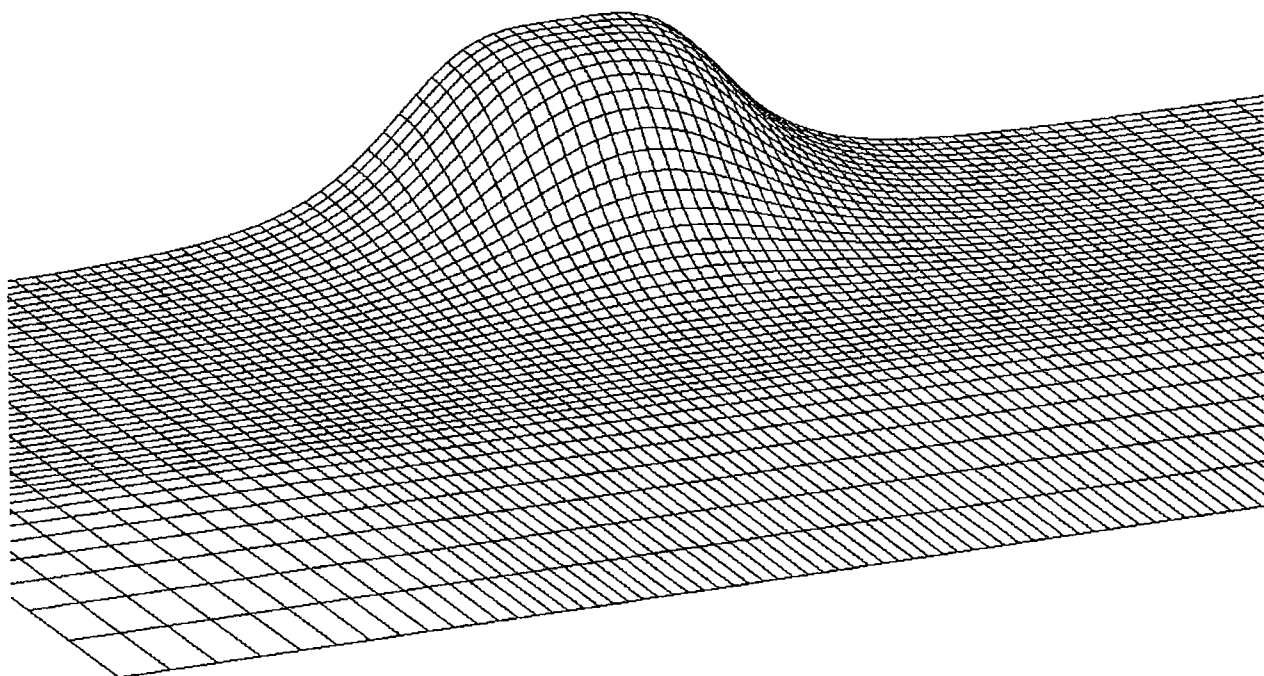


Figura 6.7 - Topografia discretizada da montanha alta (200 mm)

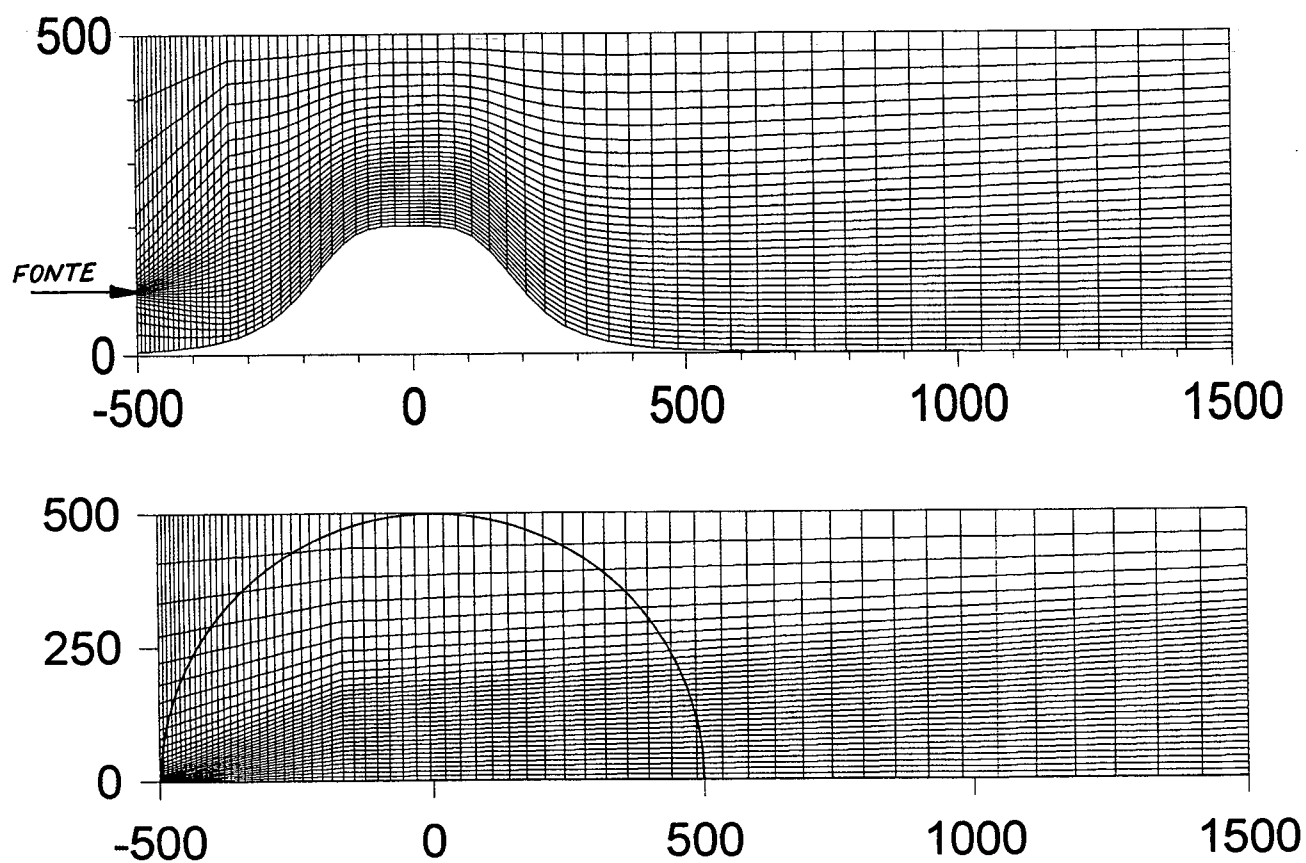


Figura 6.8 - Malha grosseira para a concentração (casos D2 e E2)
Vista lateral (acima) e vista superior (abaixo) - cotas em mm

6.5.2 - Comparação QUICK x WUDS

Na seção 4.4 foram apresentados os esquemas de interpolação WUDS e QUICK. Na simulação do caso de túnel de vento (e do experimento em escala real, objeto do capítulo 7) o esquema QUICK foi empregado nas equações do movimento, energia e concentração e o esquema WUDS nas equações de k e ϵ . As razões para essa escolha estão explicadas no final da seção 4.4.2. Com a finalidade de verificar as diferenças nas soluções numéricas, nesta seção comparamos alguns resultados obtidos usando-se o QUICK+WUDS (conforme descrito acima, que chamaremos apenas de QUICK) com resultados usando-se o WUDS para todas as equações do modelo. O caso escolhido para as comparações é o E2, já que este é certamente o mais delicado entre os casos estudados, por tratar-se de atmosfera estável e montanha alta.

Inicialmente vejamos a influência do esquema de interpolação sobre a solução do escoamento, observando os perfis de velocidade e difusividade turbulenta, já que estas são as variáveis que irão afetar diretamente a dispersão de massa. As figuras 6.9, 6.10 e 6.11 mostram perfis verticais de velocidade e difusividade ao longo do escoamento ($x=0$ corresponde ao topo da montanha), no plano de simetria ($y=0$). Na figura 6.9 nota-se que a influência do esquema de interpolação sobre a velocidade é pequena. Também a tendência de mudança com o refino de malha é a mesma para o QUICK e o WUDS. Nas figuras 6.10 e 6.11 nota-se que a montante da montanha a influência do esquema de interpolação sobre as difusividades turbulentas também é pequena. Mas a jusante percebe-se grandes diferenças entre os resultados obtidos com o QUICK e com o WUDS.

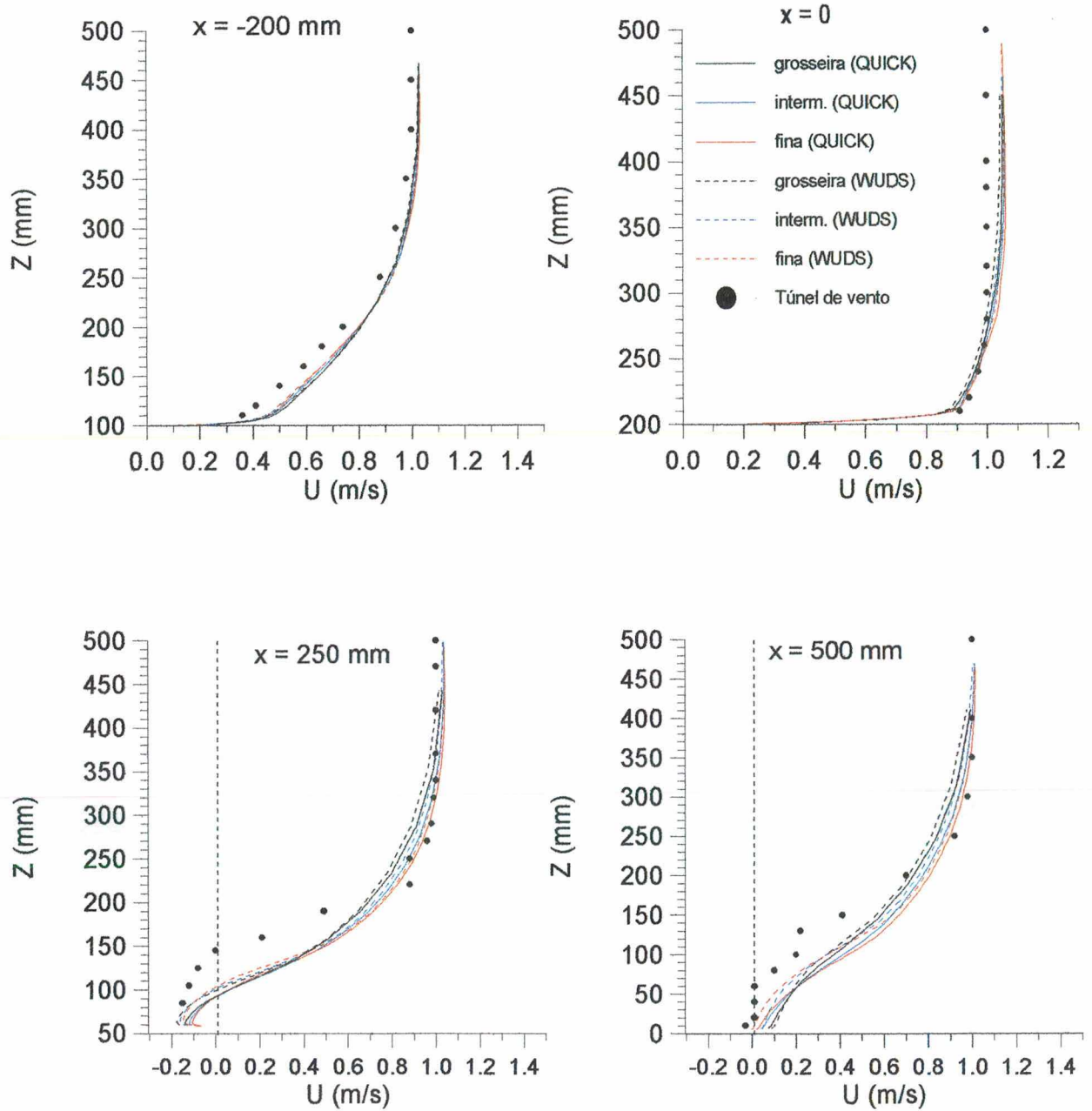


Figura 6.9 - Perfis de velocidade longitudinal (u) no plano de simetria ($y=0$) - comparação QUICK x WUDS

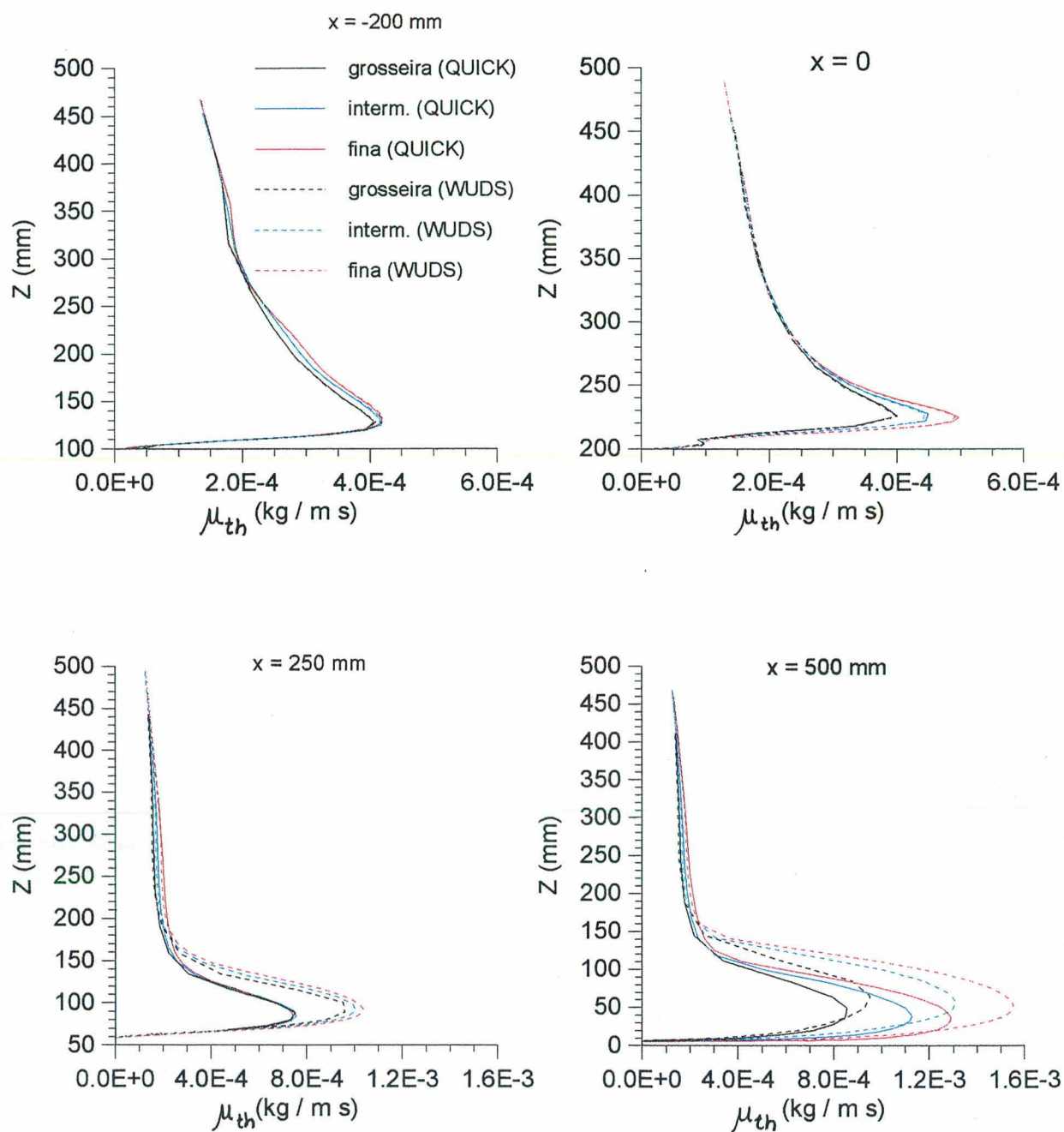


Figura 6.10 - Perfis de viscosidade turbulenta horizontal para momento ($\mu_{th} = \rho K_x^m = \rho K_y^m$) no plano de simetria ($y=0$) - comparação QUICK x WUDS

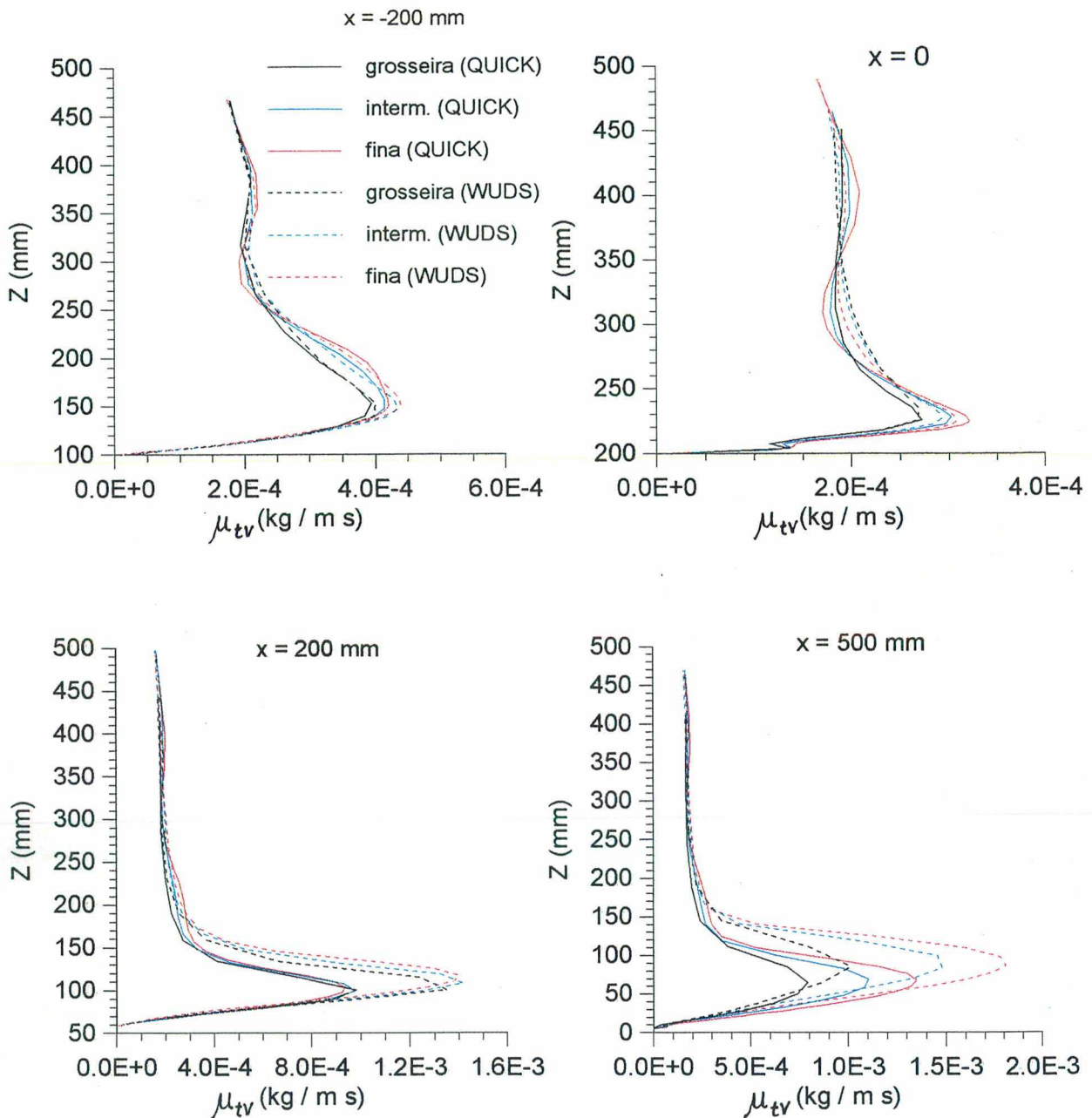


Figura 6.11 - Perfis de viscosidade turbulenta vertical para escalares ($\mu_{tv} = \rho K_z^h$) no plano de simetria ($y=0$) - comparação QUICK x WUDS

Passemos agora aos resultados de concentração. São mostrados os resultados de diversas simulações, com relação ao refino de malha e esquemas de interpolação, não só para a solução da concentração mas também para a do escoamento, a fim de verificar como a solução deste (afetada por esquemas de interpolação e refino de malha) influencia os perfis de concentração. No primeiro estudo, a concentração é resolvida unicamente em malha fina. As variantes são os esquemas de interpolação e as malhas empregadas no cálculo do escoamento. Nos perfis de concentração mostrados na figura 6.12 pode-se notar significativas diferenças nos resultados,

que no caso do esquema WUDS mostram-se com caráter muito mais difusivo. Certamente os resultados obtidos com o QUICK sofrem muito menos os efeitos de falsa difusão (ou difusão numérica), característicos de esquemas de primeira ordem. Os resultados de velocidade vistos acima (figura 6.9) não mostram diferenças significativas devido aos gradientes no campo de velocidade não serem tão intensos como os que ocorrem no caso da concentração.

No segundo estudo, o escoamento é resolvido sempre na malha fina. São verificadas as influências do refino de malha para a concentração e dos esquemas de interpolação. Na figura 6.13 é importante notar dois fatos. Em primeiro lugar, novamente se constata nos perfis obtidos com o WUDS o caráter mais difusivo da solução, o qual diminui com o refino de malha, tendendo a se aproximar dos perfis obtidos com o QUICK. Em segundo lugar, com o refino de malha (da concentração), as mudanças nos perfis do QUICK são menos acentuadas que aquelas nos perfis obtidos com o WUDS.

No terceiro (e último) estudo comparativo entre os esquemas de interpolação, constatamos que, considerando-se os resultados de concentração (que é nosso objetivo final), o emprego do QUICK é essencialmente importante na solução da concentração (e não no escoamento). Neste estudo foram empregadas as malhas finas tanto para o escoamento quanto para a concentração. Na figura 6.14 nota-se que a adoção do WUDS ou do QUICK para o escoamento praticamente não interferiu nos resultados de concentração. No entanto, na solução da concentração o uso de esquemas diferentes levou a resultados significativamente distintos. Nas legendas da figura 6.14, primeiro está o esquema utilizado para o escoamento e depois o utilizado para a concentração, separados por uma barra (/). Finalmente, na figura 6.15 é mostrada a curva de concentração máxima ao nível do solo, que ocorre no plano de simetria do problema ($y=0$). Devido a maior difusão que ocorre com o WUDS (certamente por difusão numérica) a pluma atinge o solo antes (comparado com a solução do QUICK), bem como a concentração a jusante da montanha ($x>100$ mm) é menor, claramente pela maior difusão sofrida pela pluma desde a fonte.

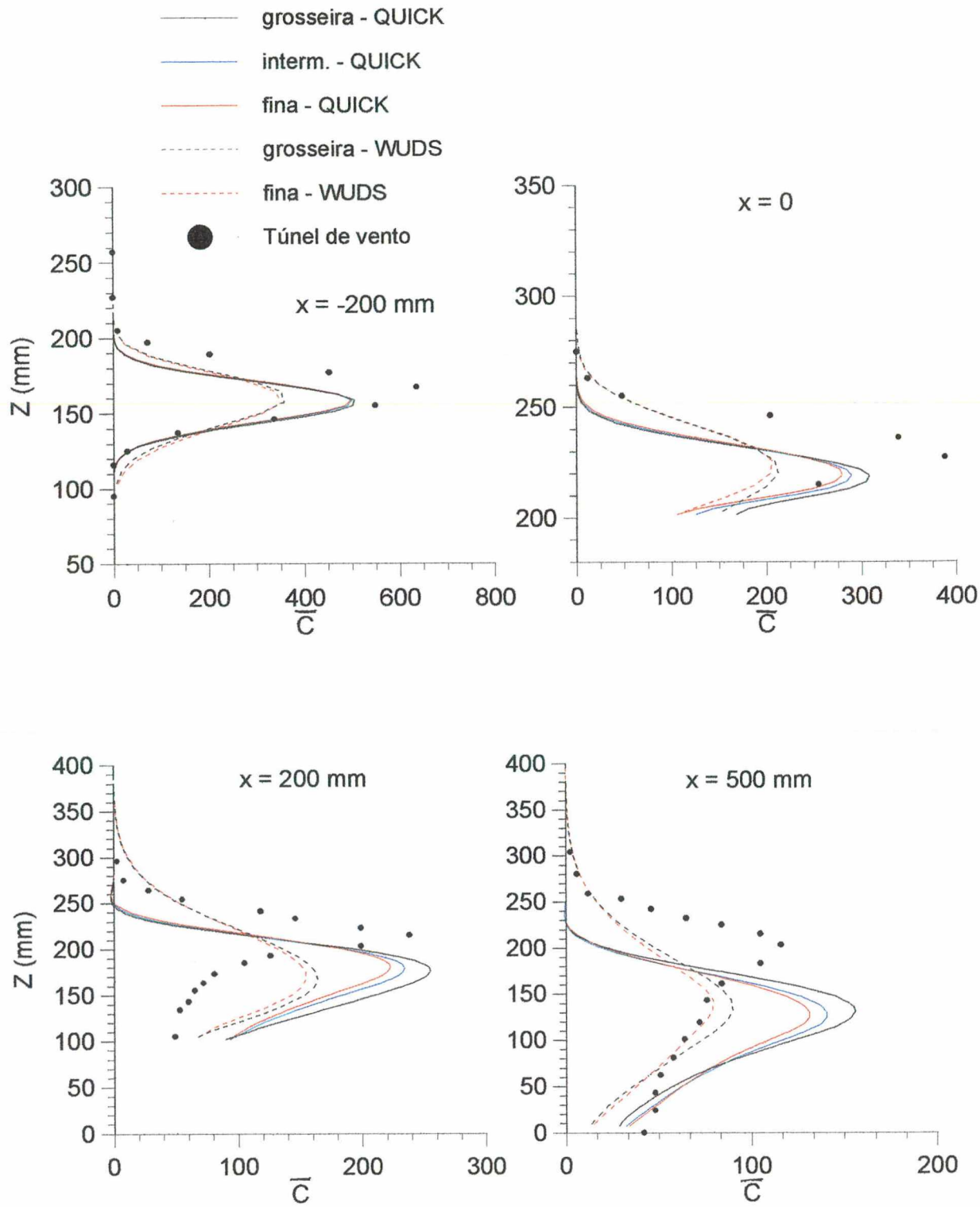


Figura 6.12 - Perfis de concentração no plano de simetria - influência da malha do escoamento e do esquema de interpolação

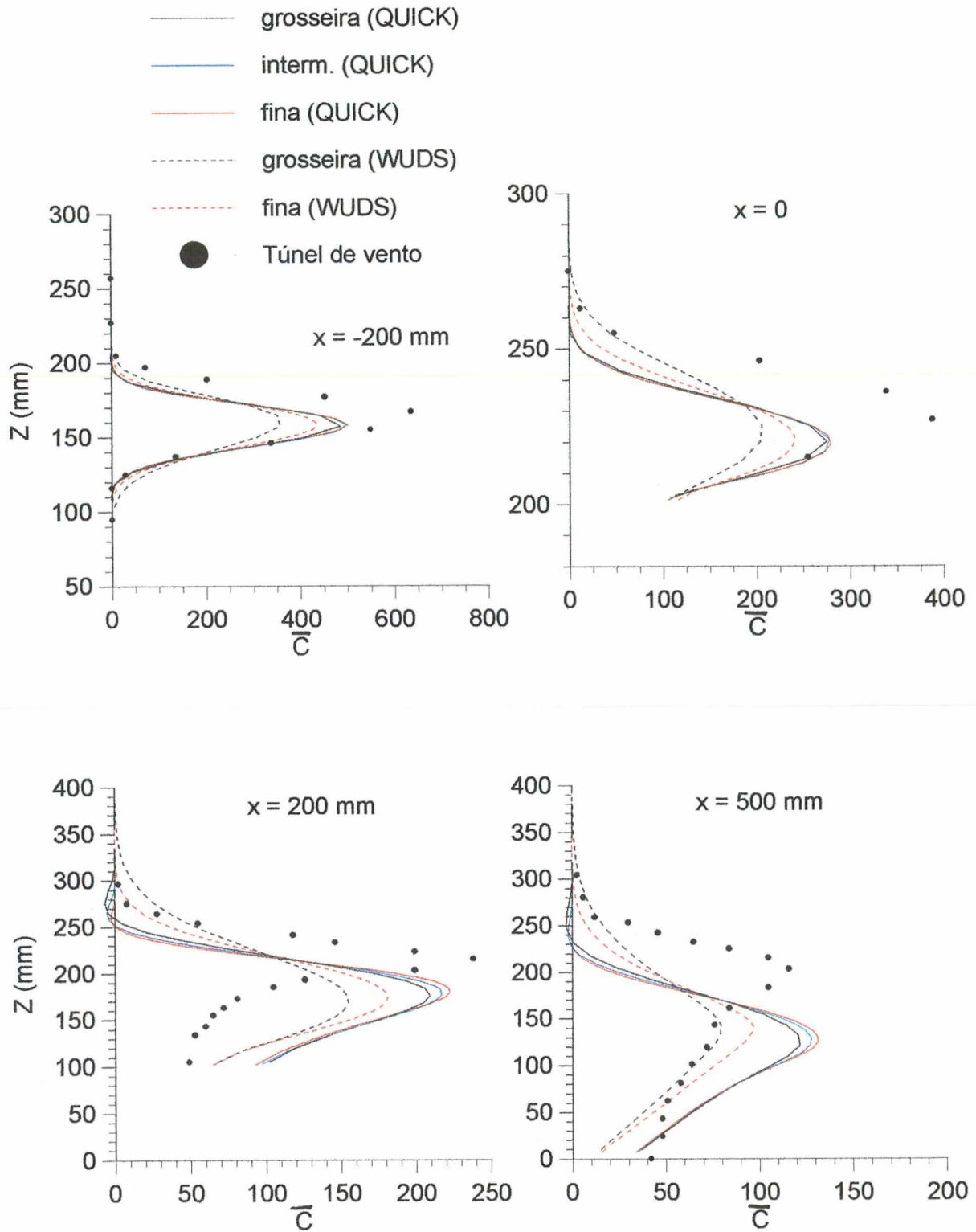


Figura 6.13 - Perfis de concentração no plano de simetria - influência da malha da concentração e do esquema de interpolação

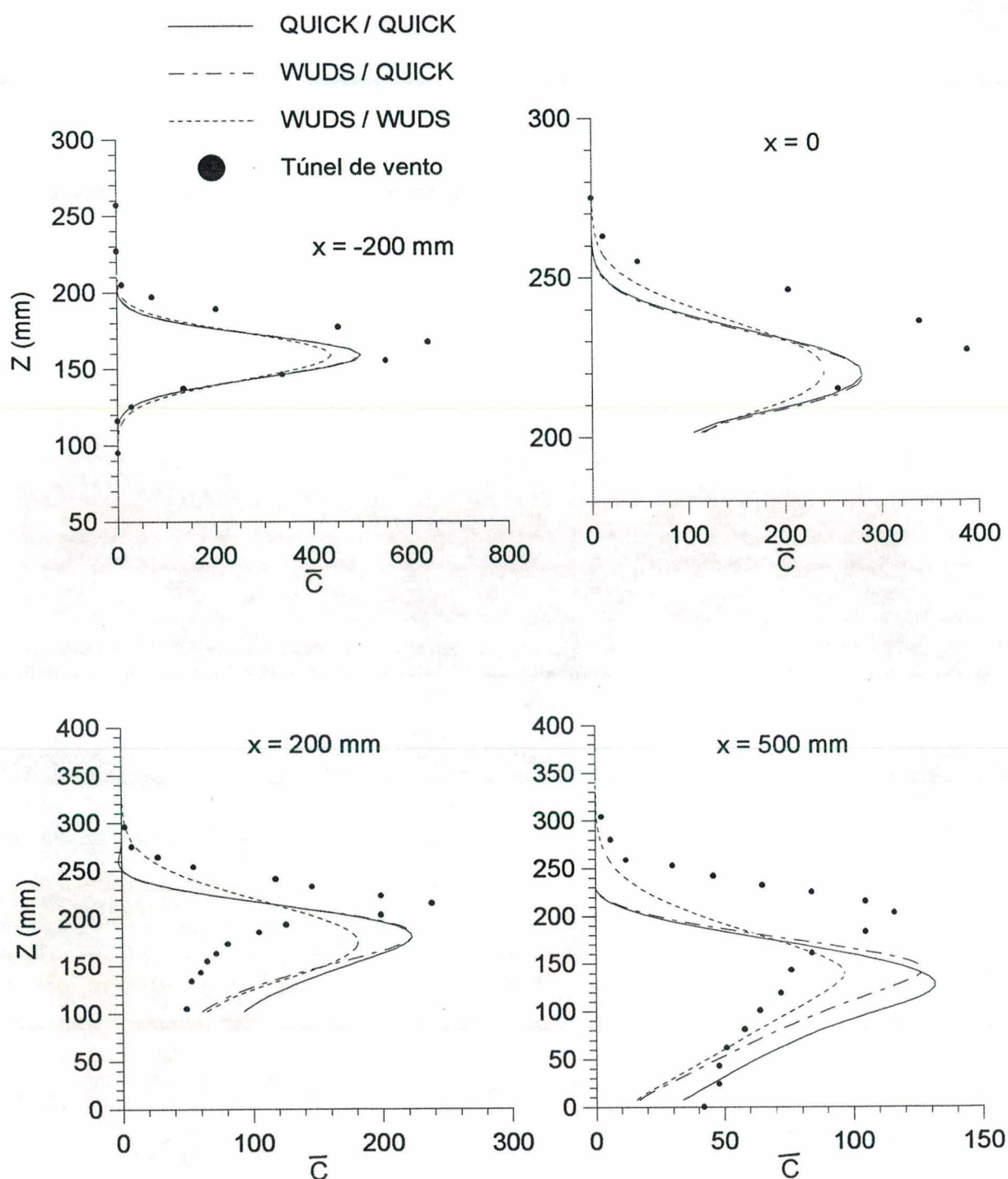


Figura 6.14 - Perfis de concentração no plano de simetria - influência do esquema de interpolação usado para o escoamento e para a concentração

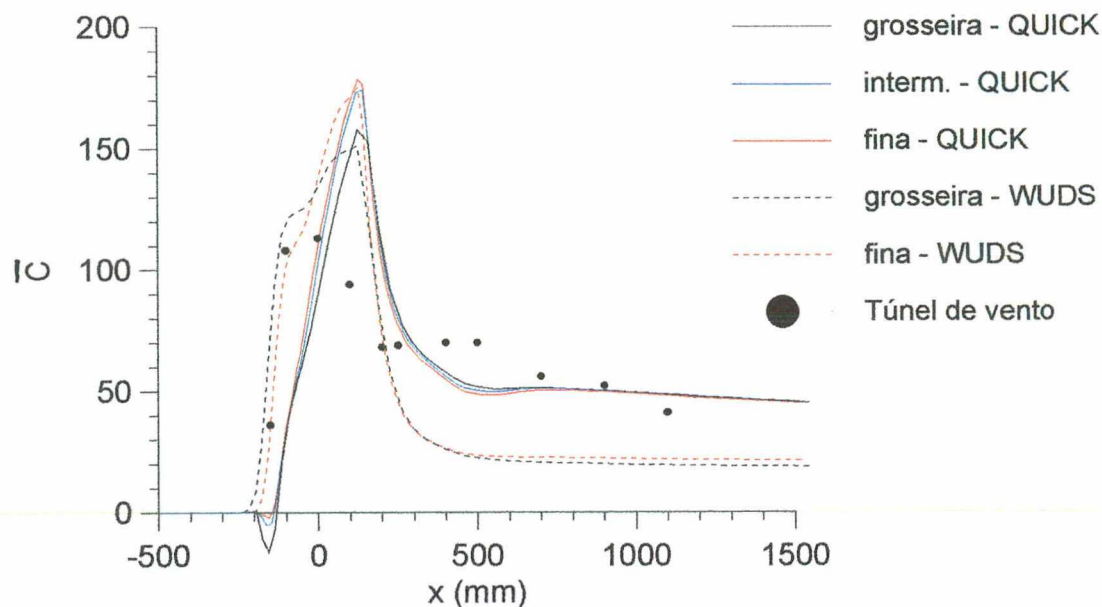


Figura 6.15 - Concentração sobre o solo, no plano de simetria - influência das malhas e do esquema de interpolação

6.5.3 - Índice de Convergência de Malha

O estudo de independência dos resultados com relação à malha é indispensável em qualquer solução numérica. Num método consistente e estável, quando o número de volumes (ou pontos da malha) tende ao infinito a solução numérica tende à solução exata. Na realidade, como não se pode refinar indefinidamente a malha (por limitação de recursos computacionais e problemas de estabilidade e convergência), compara(m)-se algum (uns) parâmetro (s) ou variável (eis) de interesse da solução obtida com sucessivos refinamentos de malha até que as mudanças nos resultados sejam suficientemente pequenas, a ponto de serem aceitáveis segundo a precisão que se deseja. Em problemas uni e bidimensionais de dinâmica dos fluidos não é (geralmente) difícil, dentro dos recursos de velocidade de processamento e memória computacional atualmente disponíveis, obter-se soluções numéricas independentes do tamanho da malha. No entanto, em problemas tridimensionais, ao menos aqueles do tipo que estamos estudando, não é ainda possível refinarmos tanto as malhas a ponto de que a solução obtida seja independente de malha, no conceito acima definido. Ou seja, estamos sempre obtendo soluções numéricas incutidas de erros associados à malha empregada. Entendemos que é necessário ter-se claro conhecimento desta limitação e, do ponto de vista de engenharia, avaliar quantitativamente esses erros para saber se a solução obtida tem utilidade, dentro dos níveis de precisão requeridos no problema.

Em um interessante artigo, Roache (1994) constata a verdadeira confusão existente na maneira de se reportar os estudos de refino de malha procedidos pelos analistas numéricos, na literatura científica e de engenharia. Como exemplo, é citado um caso hipotético. Em um trabalho afirma-se que aumentado a densidade da malha em 50% , resultou numa diferença em algum parâmetro da solução de 4% (da solução de malha fina) usando um método de primeira ordem. Em um outro trabalho, a densidade da malha foi dobrada, resultando numa diferença de 6% , usando um método de segunda ordem. Qual solução de malha fina é mais confiável (melhor convergida) ? Ainda mais, pode o leitor ter alguma expectativa razoável de que esses números representam uma banda de erro percentual, quer dizer, que as soluções de malha fina são provavelmente precisas dentro dos 4 ou 6% da solução verdadeira (exata) ?

Com a perspectiva de uniformizar o procedimento de quantificação dos estudos de refino de malha, Roache propôs o chamado Índice de Convergência de Malha, abreviado de GCI (*Grid Convergence Index*), o qual decidimos adotar. A idéia básica é relacionar aproximadamente os resultados de qualquer teste de refino de malha com os resultados esperados de um teste em que a malha é dobrada (com relação ao número de pontos) usando um método de segunda ordem. O GCI baseia-se num estimador de erro de refino de malha obtido da teoria da extrapolação de Richardson generalizada. Detalhes estão em Roache (1994). Sendo f_1 e f_2 , respectivamente, as soluções de malha fina e grosseira, a variação relativa da solução é dada por

$$\lambda = \frac{f_2 - f_1}{f_1} \quad (6.25)$$

O estimador de erro relativo da solução de malha fina é

$$E_1 = \frac{\lambda}{r^p - 1} \quad (6.26)$$

onde r é o fator de aumento do número de pontos da malha em cada direção (n_1/n_2) e p é a ordem de acurácia do método numérico. O índice de convergência da malha fina é definido por

$$GCI = \frac{3|\lambda|}{r^p - 1} \quad (6.27)$$

Note que se o método é de segunda ordem ($p=2$) e o número de pontos da malha é duplicado em cada direção ($r=2$), obtém-se $GCI = \lambda$, ou seja, o índice de convergência da malha é igual ao erro relativo da solução de malha fina. É por esta razão que Roache tomou o valor 3 na definição do GCI dada por (6.27), quer dizer, adotou os estudos de refino de malha com método de segunda ordem e duplicação no número de pontos da malha como padrão de comparação.

Na seção anterior uma mostra qualitativa do estudo de refino de malha foi apresentada em conjunto com a comparação entre os esquemas de interpolação. Nesta seção apresentamos resultados quantitativos (através do GCI) sobre o refinamento de malha. Nos casos de túnel de vento simulados, empregamos os resultados de malha grosseira e fina para calcular o GCI de algumas variáveis do problema, quais sejam, velocidade, difusividade turbulenta e concentração. O valor de r é 2.25 e p foi assumido como 2 (conservativamente), já que o esquema QUICK é “formalmente” de terceira ordem (termos convectivos) e diferenças centrais é de segunda ordem (termos difusivos). Como os pontos da malha grosseira não coincidem com os da malha fina, é necessário interpolar a solução desta. O programa GRIDCON foi implementado para interpolar os valores da malha fina para a malha grosseira (utilizando as rotinas de interpolação do programa INTERGRID, descrito na seção 4.14) e realizar os cálculos do GCI. Este programa realiza uma interpolação bilinear no plano $\xi\eta$, seguida de uma interpolação linear na direção vertical, γ , resultando desta forma, acurácia de segunda ordem.

As figuras 6.16, 6.17 e 6.18 (respectivamente para os casos E0, D1 e E2) mostram perfis verticais do índice de convergência de malha no plano de simetria para a velocidade longitudinal (u), a energia cinética turbulenta (k), a difusividade vertical para escalares (K_h^z) e a concentração (c). É mostrado o comportamento local do GCI para algumas posições do domínio. Note que os maiores erros ocorrem em geral próximo do solo, onde os gradientes das variáveis são mais acentuados. Isto quer dizer que um refinamento ainda melhor nesta região seria desejável. No entanto, devido à limitação computacional não foi possível utilizar mais volumes na direção vertical.

Também foi determinado um GCI global para as soluções de malha fina, por variável e por caso, calculado como uma média dos GCI's de todos os pontos da malha grosseira. Este GCI global (acompanhado de seu desvio padrão) representa uma estimativa do comportamento do erro médio associado à solução de malha fina. A tabela 6.3 apresenta os GCI's globais (percentual) para todos os casos simulados de túnel de vento, acompanhados de seus respectivos desvios padrões (entre parênteses). Concentrações (normalizadas conforme 6.28) inferiores a 1 m^{-2} não foram incluídas no cálculo do GCI global.

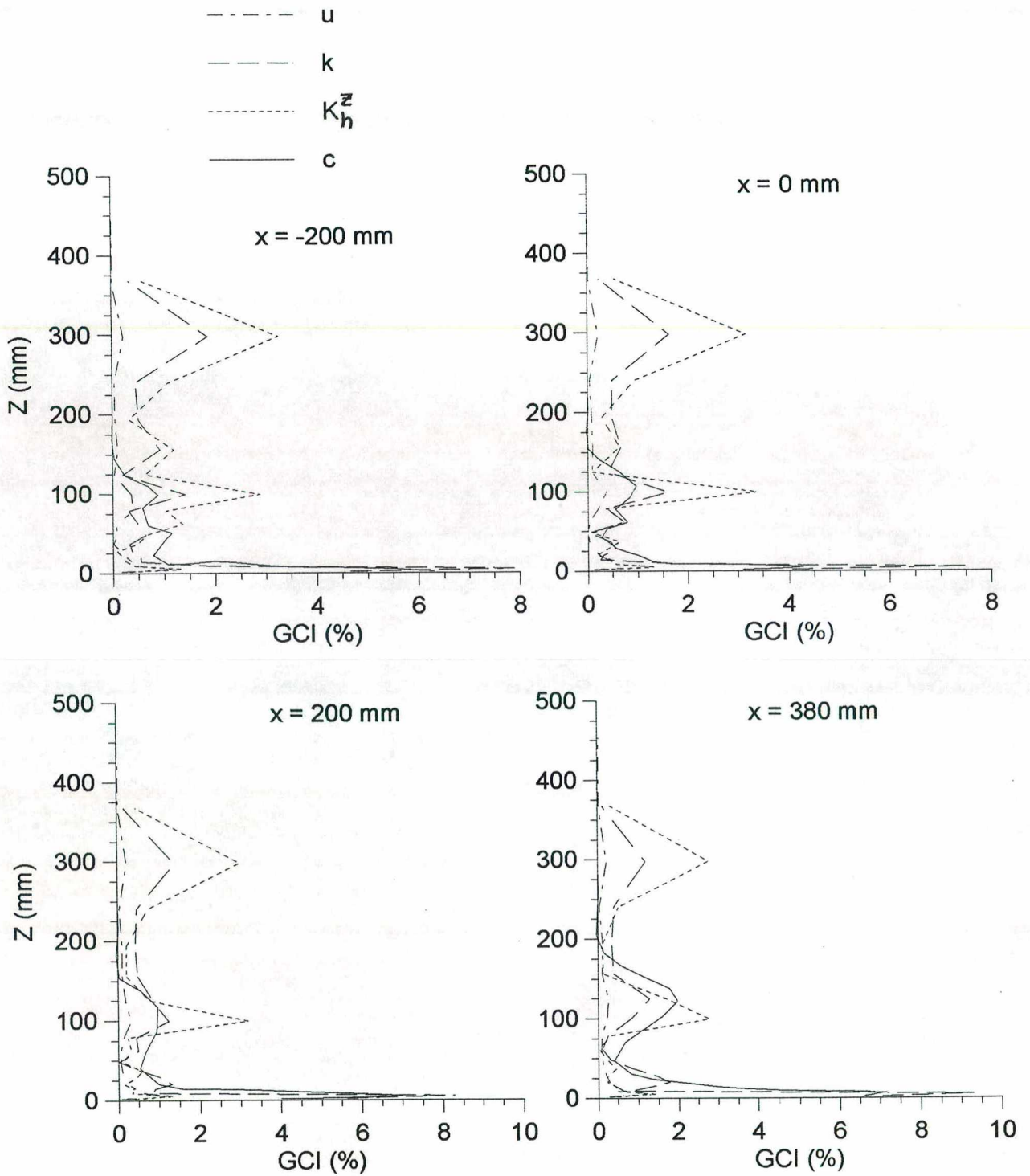


Figura 6.16 - GCI para velocidade, energia cinética turbulenta, difusividade turbulenta vertical para escalares e concentração - caso E0

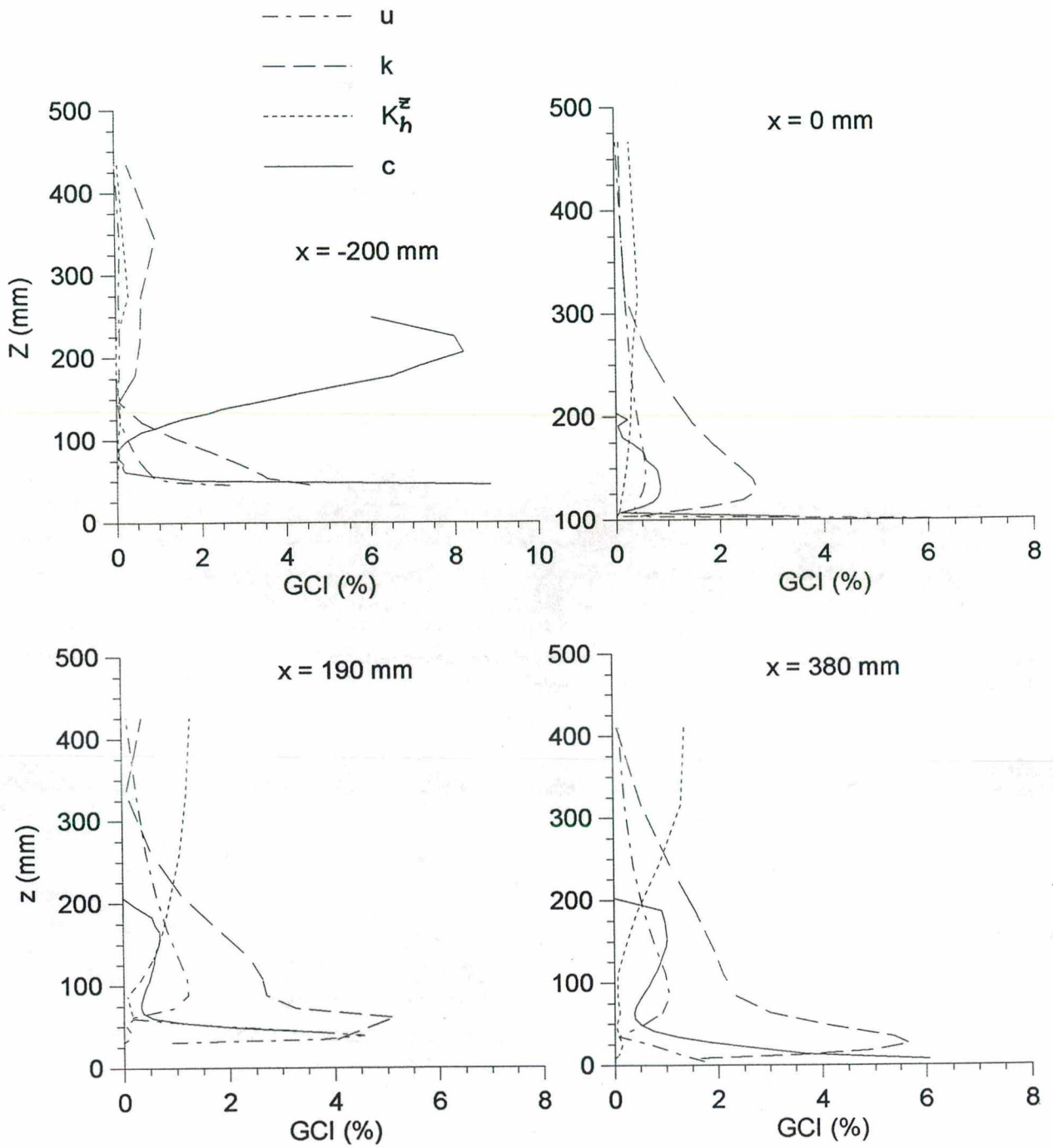


Figura 6.17 - GCI para velocidade, energia cinética turbulenta, difusividade turbulenta vertical para escalares e concentração - caso D1

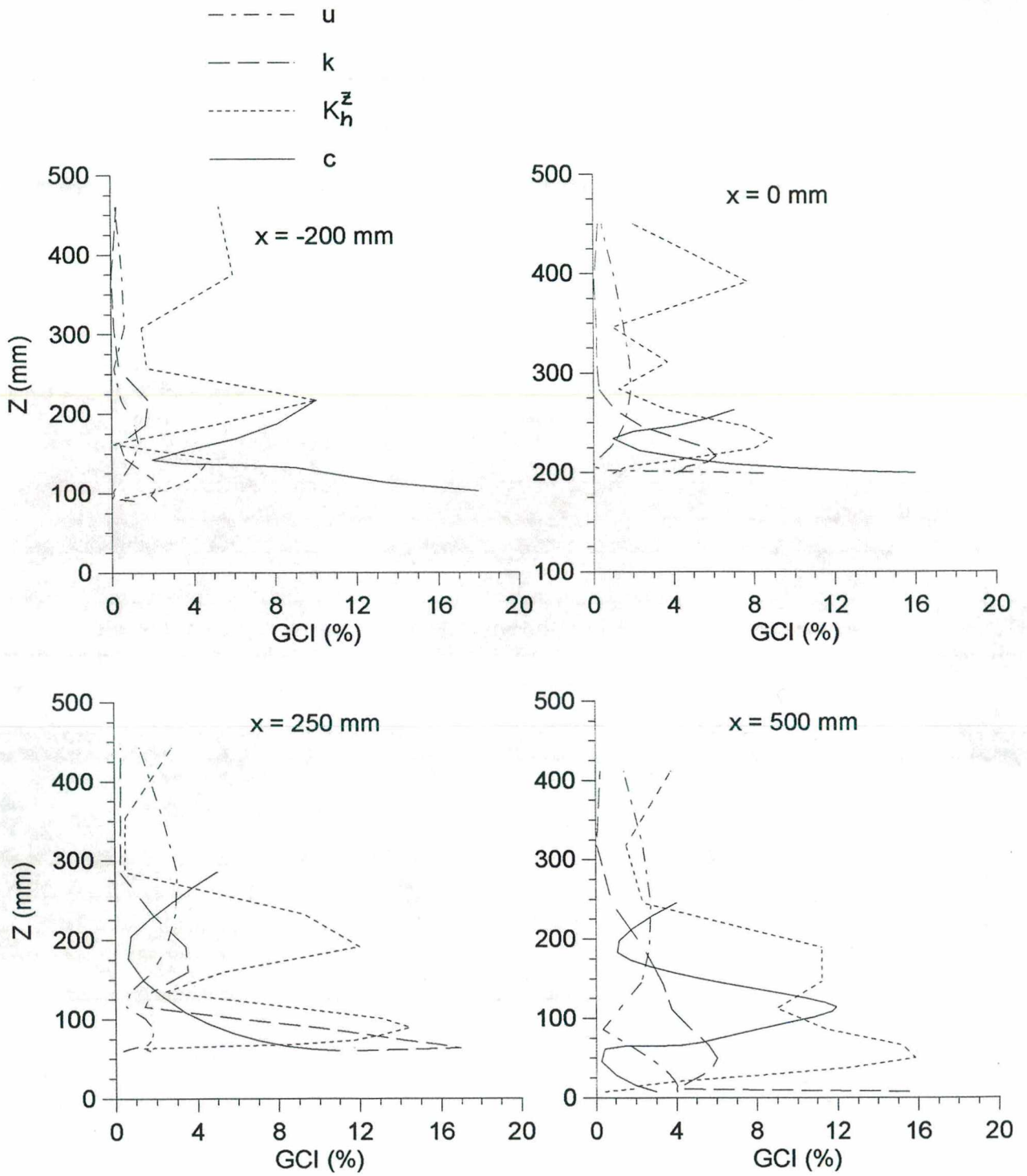


Figura 6.18 - GCI para velocidade, energia cinética turbulenta, difusividade turbulenta vertical para escalares e concentração - caso E2

Caso / Variáveis	u	k	K_h^z	c
D0	0.21 (0.25)	0.80 (1.89)	0.43 (1.57)	0.47 (0.63)
D1	0.28 (0.97)	0.84 (2.03)	0.18 (0.25)	3.82 (4.63)
D2	0.61 (2.33)	1.05 (2.62)	1.06 (2.98)	5.25 (7.46)
E0	0.26 (0.32)	1.75 (2.42)	1.28 (2.12)	0.52 (0.71)
E1	0.42 (1.53)	1.69 (2.88)	1.77 (3.13)	5.56 (8.45)
E2	0.69 (2.48)	1.14 (3.26)	2.51 (4.05)	6.79 (9.33)

Tabela 6.3 - GCI médio global (percentual) para os casos de túnel de vento (desvio padrão entre parênteses, em pontos percentuais)

6.6 - Resultados do Escoamento

Apresentamos e discutimos primeiramente a solução do escoamento para depois dedicarmos atenção aos resultados de concentração. Comparamos nesta seção os resultados numéricos (através do programa NAVIER, seção 4.14) de velocidade (u) e energia cinética turbulenta (k) obtidos com o k - ϵ modificado (anisotrópico, seção 2.4.2), o k - ϵ clássico (isotrópico, seção 2.4.1) e valores experimentais medidos no túnel de vento. A figura 6.19 mostra perfis verticais da velocidade u ao longo da passagem do escoamento sobre a montanha, no plano de simetria do problema ($y=0$), para o caso D1. Há boa concordância das soluções numéricas com os valores experimentais. Note que os resultados do k - ϵ clássico e modificado foram praticamente idênticos. Isto deve-se ao fato de que o escoamento é neutro (sem estratificação), e portanto as difusividades turbulentas horizontal e vertical são semelhantes. Para este mesmo caso (D1), a figura 6.20 mostra os perfis de energia cinética turbulenta. As discrepâncias entre os resultados numéricos e experimentais para $x=-200$ ("subida" montanha) provavelmente devem-se a algo estranho no comportamento dos valores medidos em túnel de vento, pois os valores de k no topo da montanha ($x=0$, onde a intensidade turbulenta é maior) estão inferiores aos valores de k numa posição antes ($x=-200$). Como no caso da velocidade, os valores de k dados pelos modelos k - ϵ isotrópico e anisotrópico são muito parecidos.

As figuras 6.21 e 6.22 mostram os perfis de u e k para o caso D2. A subestimação da velocidade no topo da montanha deve-se certamente a um desvio lateral maior do escoamento, contornando a montanha, previsto pelos modelos numéricos. Não sabemos explicar o porque disso, mas note que as diferenças significativas nos perfis ocorrem próximo do solo, o que nos leva a pensar que a lei de parede, da forma como foi empregada, esteja superestimando a tensão cizalhante no solo. Como no caso anterior (D1), os resultados numéricos do k - ϵ clássico e modificado são muito próximos entre si. A pequena recirculação mostrada pelos valores experimentais ($x=300$) não foi captada pelos modelos numéricos. A possível explicação para esta deficiência do k - ϵ é a de que os pronunciados gradientes de velocidade (tanto na direção vertical como na transversal), devido ao desvio de parte do escoamento em torno da montanha, causam um aumento no termo de produção de k , provocando uma elevação do nível de turbulência e das difusividades, o que diminui o tamanho da recirculação (no caso esta praticamente desaparece). Deficiência semelhante do modelo k - ϵ é verificada no escoamento bidimensional sobre um degrau, no qual o tamanho da recirculação após o mesmo é subestimada pela mesma razão acima explicada. No entanto, note na figura 6.22 que os níveis de k na posição $x=300$ (a qual está dentro da recirculação) não parece estar sendo superestimada (embora há poucos valores experimentais disponíveis). Então, com relação aos altos níveis de viscosidade turbulenta nessa região, a deficiência do k - ϵ dever ser atribuída à equação da dissipação, a qual está subestimando ϵ , e não a uma superestimação da produção de energia cinética turbulenta (ao menos para esse caso...).

Passemos agora ao caso estável E2. Perfis de u e k estão nas figuras 6.23 e 6.24. A velocidade no topo da montanha ($x=0$), ao contrário do caso D2, foi adequadamente prevista. Como trata-se de estratificação estável, ocorre um maior desvio do escoamento próximo ao solo, que tende a contornar a montanha. Isto pode ser visualizado na figura 6.25, onde são mostrados os vetores velocidade a 10 mm do solo. Os valores experimentais de k para a posição $x=500$ mm provavelmente estão incorretamente superestimados, dada a incoerência com relação aos valores nas outras posições. Com relação à recirculação após a montanha, novamente a sua intensidade foi subestimada pelo k - ϵ , provavelmente pela mesma razão explicada no parágrafo anterior, para o caso D2. A complexa recirculação tridimensional que ocorre na descida da montanha pode ser visualizada na figura 6.26, que mostra vetores velocidade a 10 mm do solo. A figura 6.27 mostra uma secção longitudinal do problema com os vetores velocidade na linha de simetria ($y=0$). Com o intuito de verificar uma possível influência dos níveis de turbulência

prescritos na entrada do escoamento sobre o comportamento da recirculação, procedemos diversos testes, alterando o comprimento de escala a montante (l_{in} dado pelas equações 6.8 e 6.13, respectivamente para os casos neutros e estáveis). Constatamos que não houve mudança no tamanho ou intensidade da recirculação, mesmo com alteração dos níveis de k na entrada. De fato o que acontece é que os níveis de turbulência após a região do topo da montanha são localmente determinados, quer dizer, k e ϵ são dominados pelos seus termos de produção e dissipação e o termo convectivo (o qual poderia trazer informação dos níveis de turbulência a montante) é muito pequeno. A figura 6.27 mostra também, em linha tracejada, o tamanho aproximado da recirculação verificada experimentalmente.

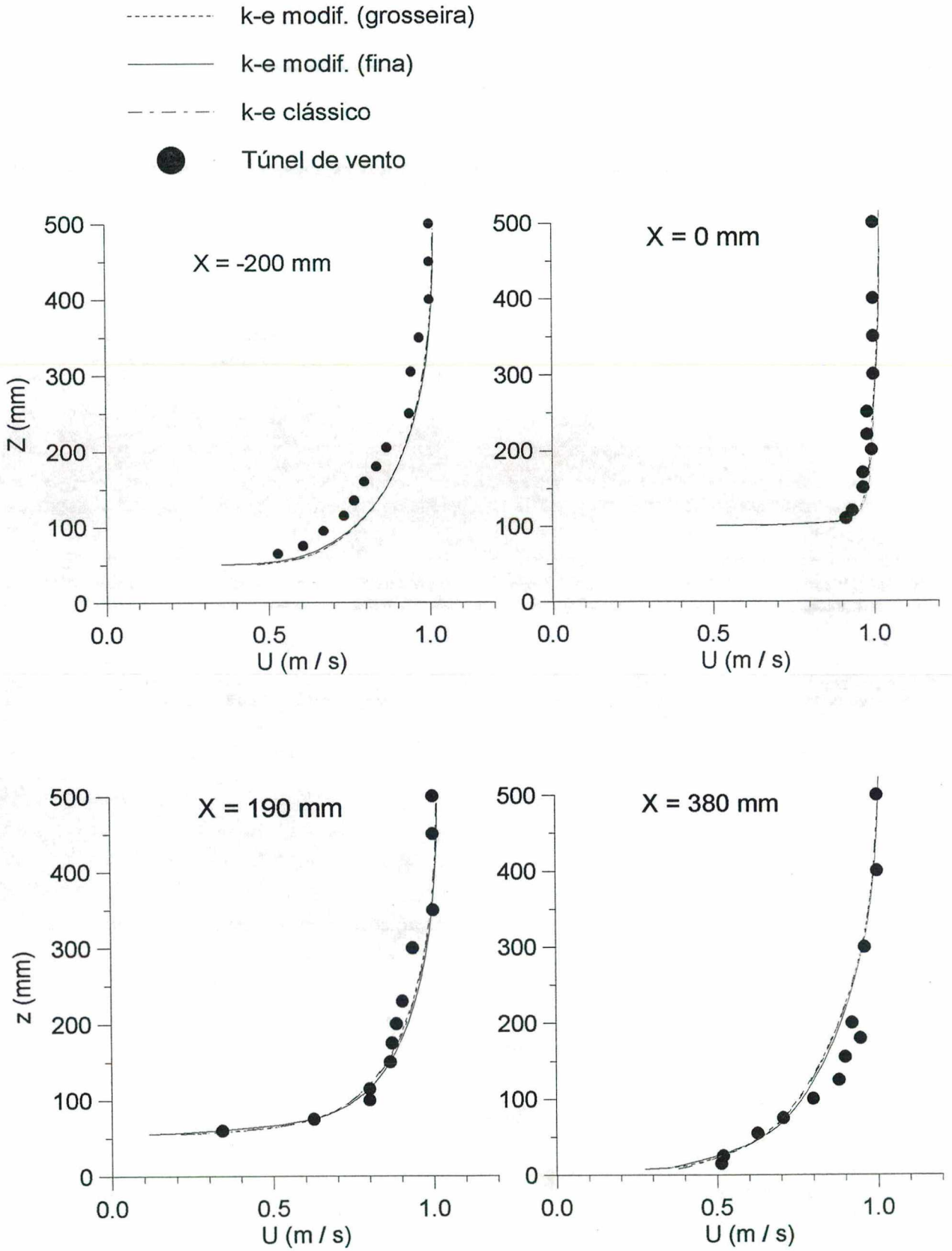


Figura 6.19 - Perfis verticais da velocidade u (em $y=0$) para o caso D1

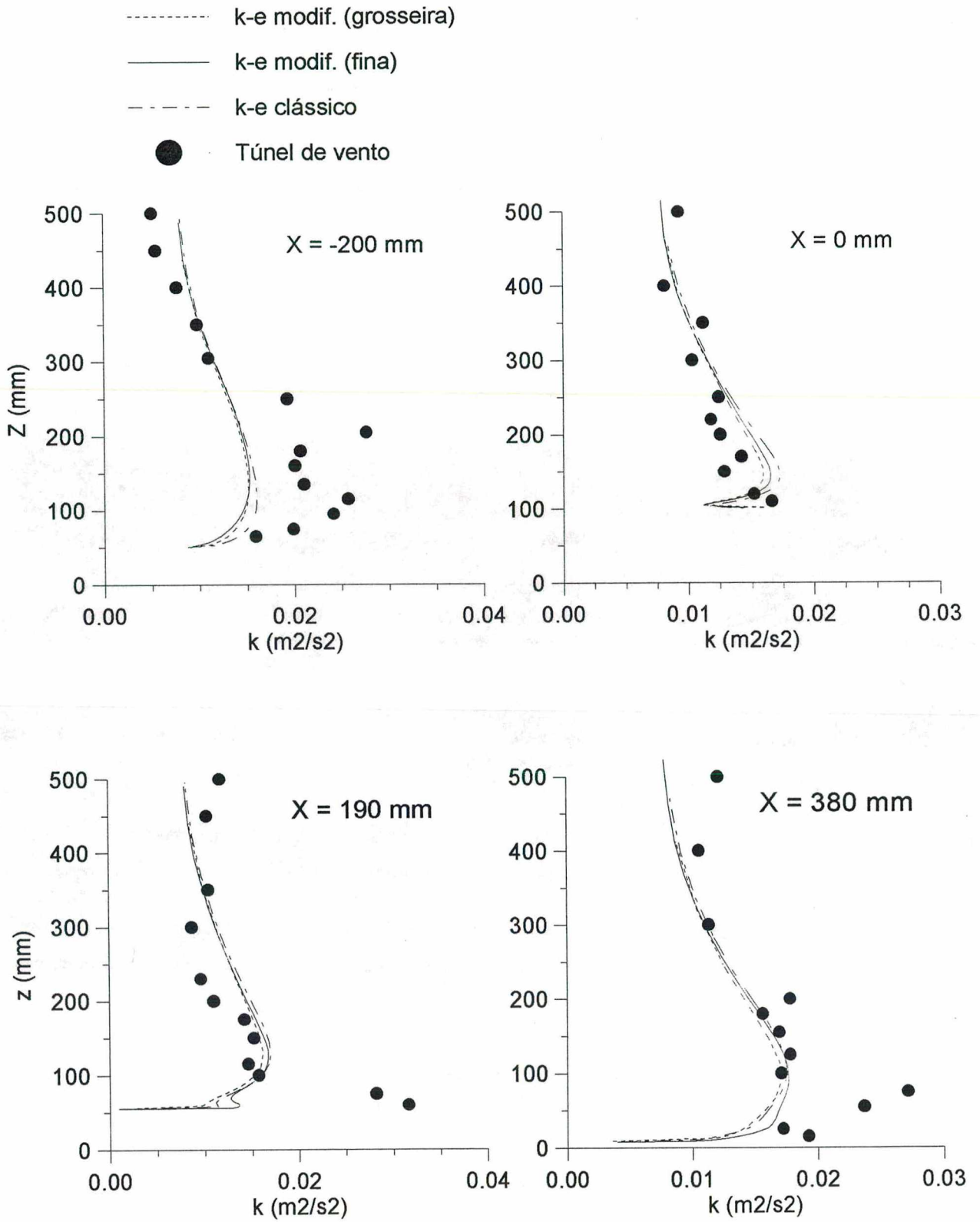


Figura 6.20 - Perfis verticais de k (em $y=0$) para o caso D1

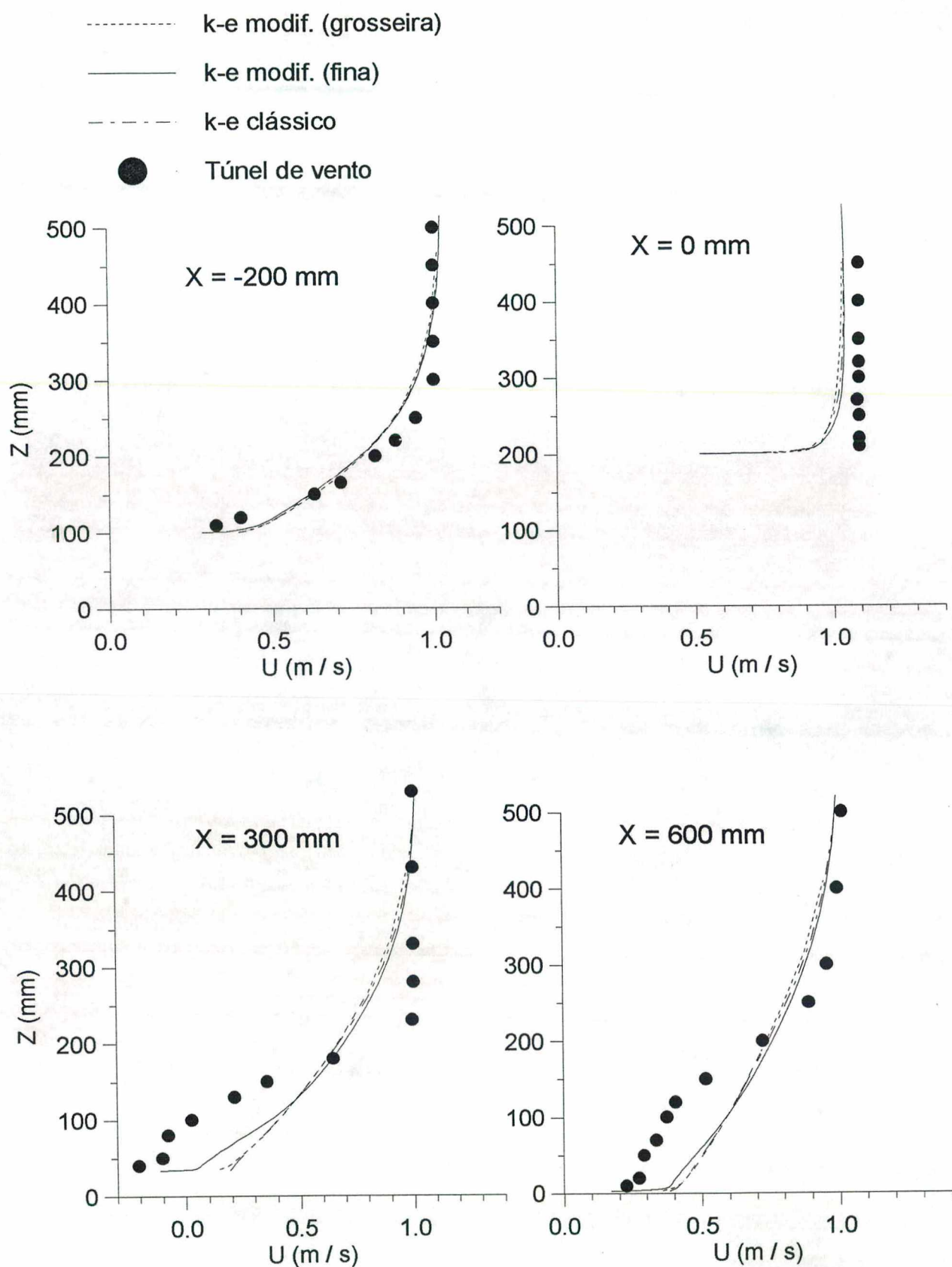


Figura 6.21 - Perfis verticais da velocidade u (em $y=0$) para o caso D2

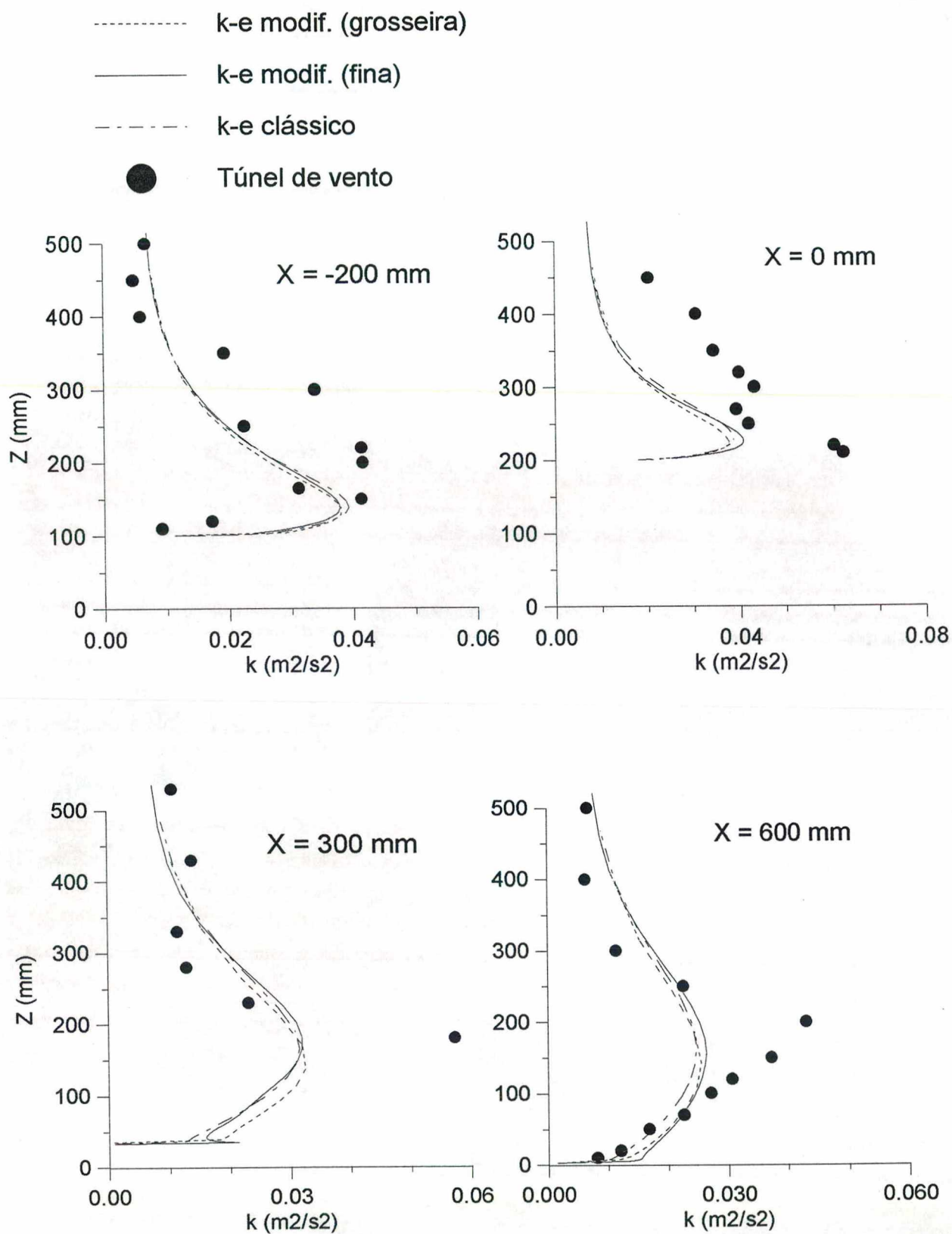


Figura 6.22 - Perfis verticais de k (em $y=0$) para o caso D2

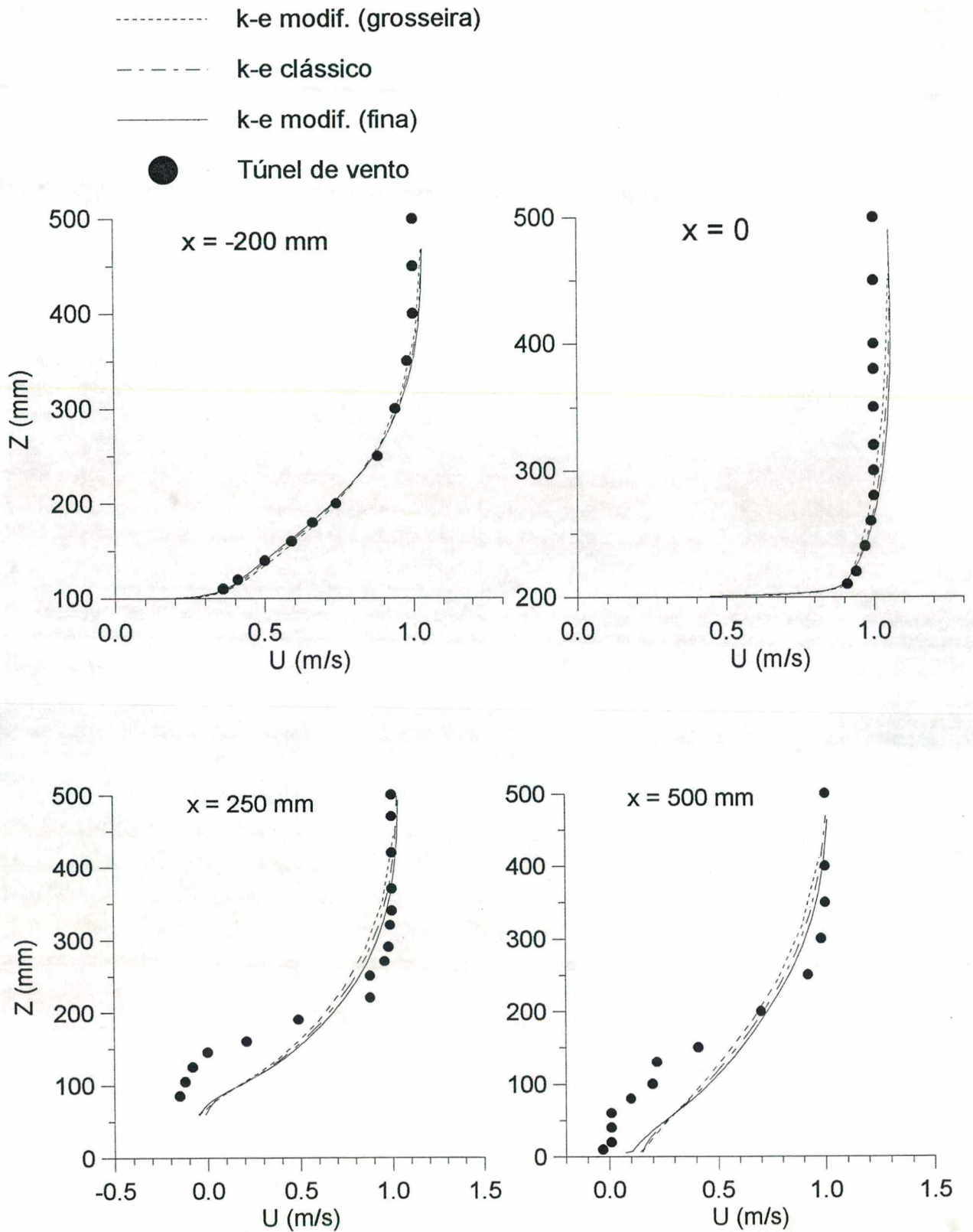


Figura 6.23 - Perfis verticais da velocidade u (em $y=0$) para o caso E2

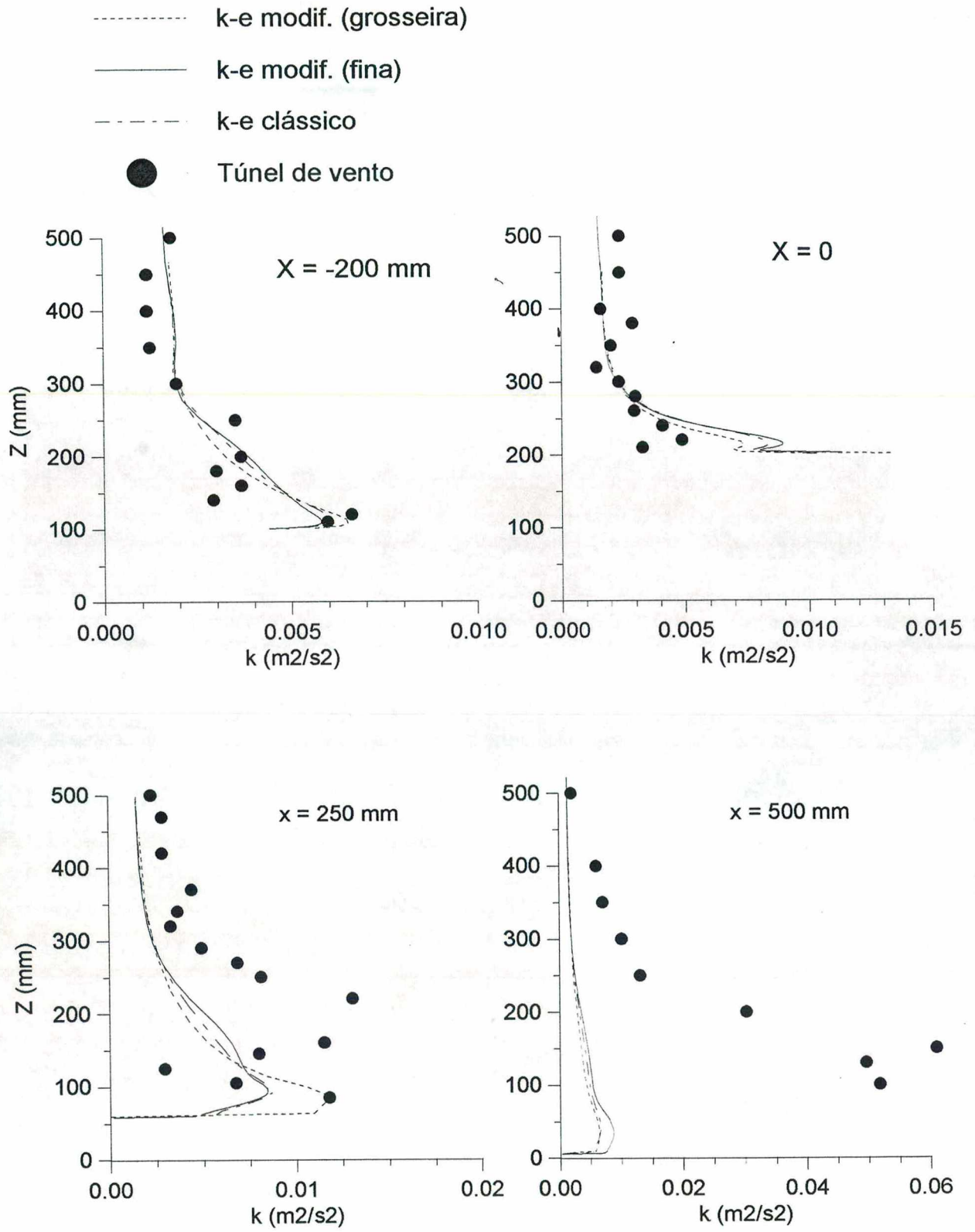


Figura 6.24 - Perfis verticais de k (em $y=0$) para o caso E2

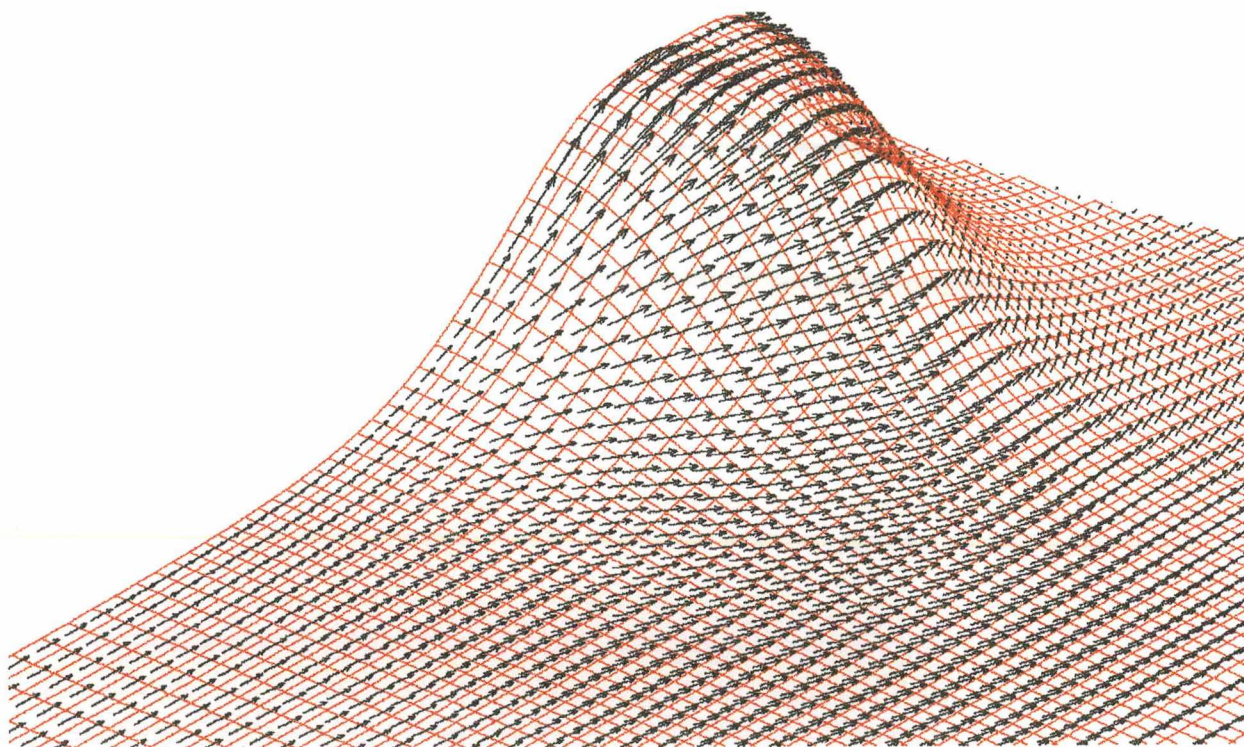


Figura 6.25 - Vetores velocidade a 10 mm do solo - caso E2 - vista a montante

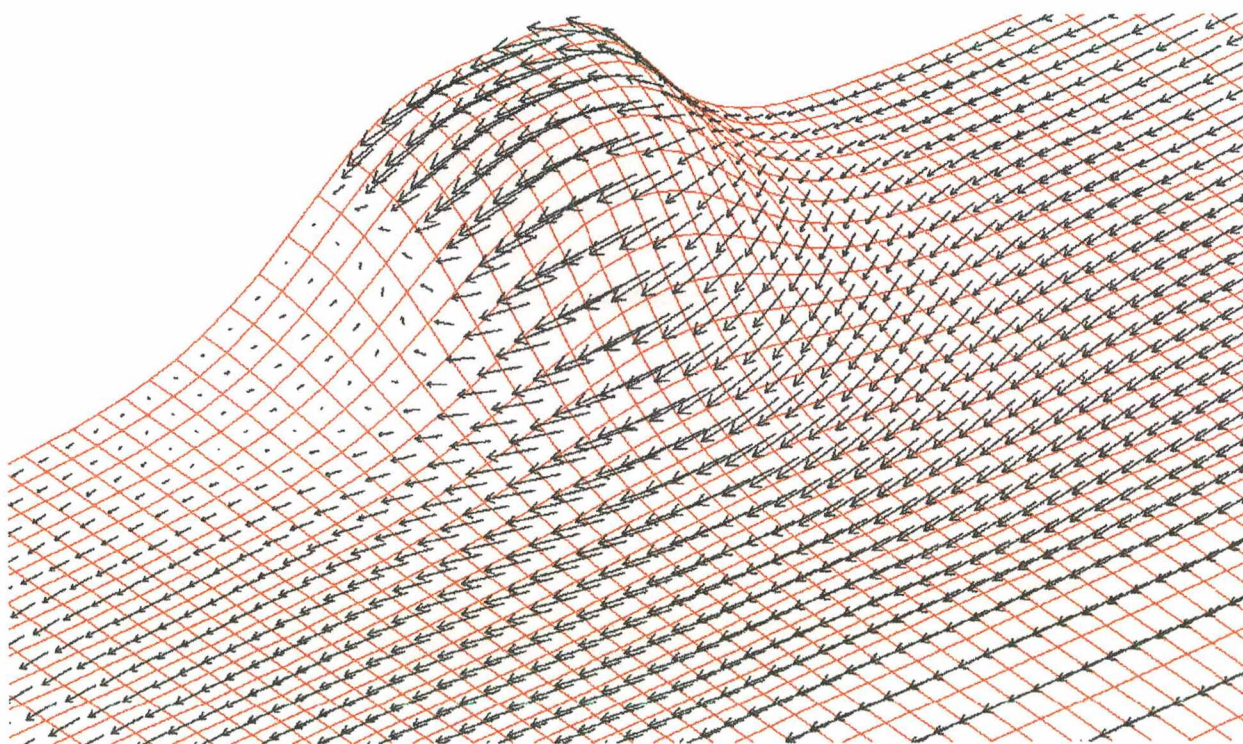


Figura 6.26 - Vetores velocidade a 10 mm do solo - caso E2 - vista a jusante

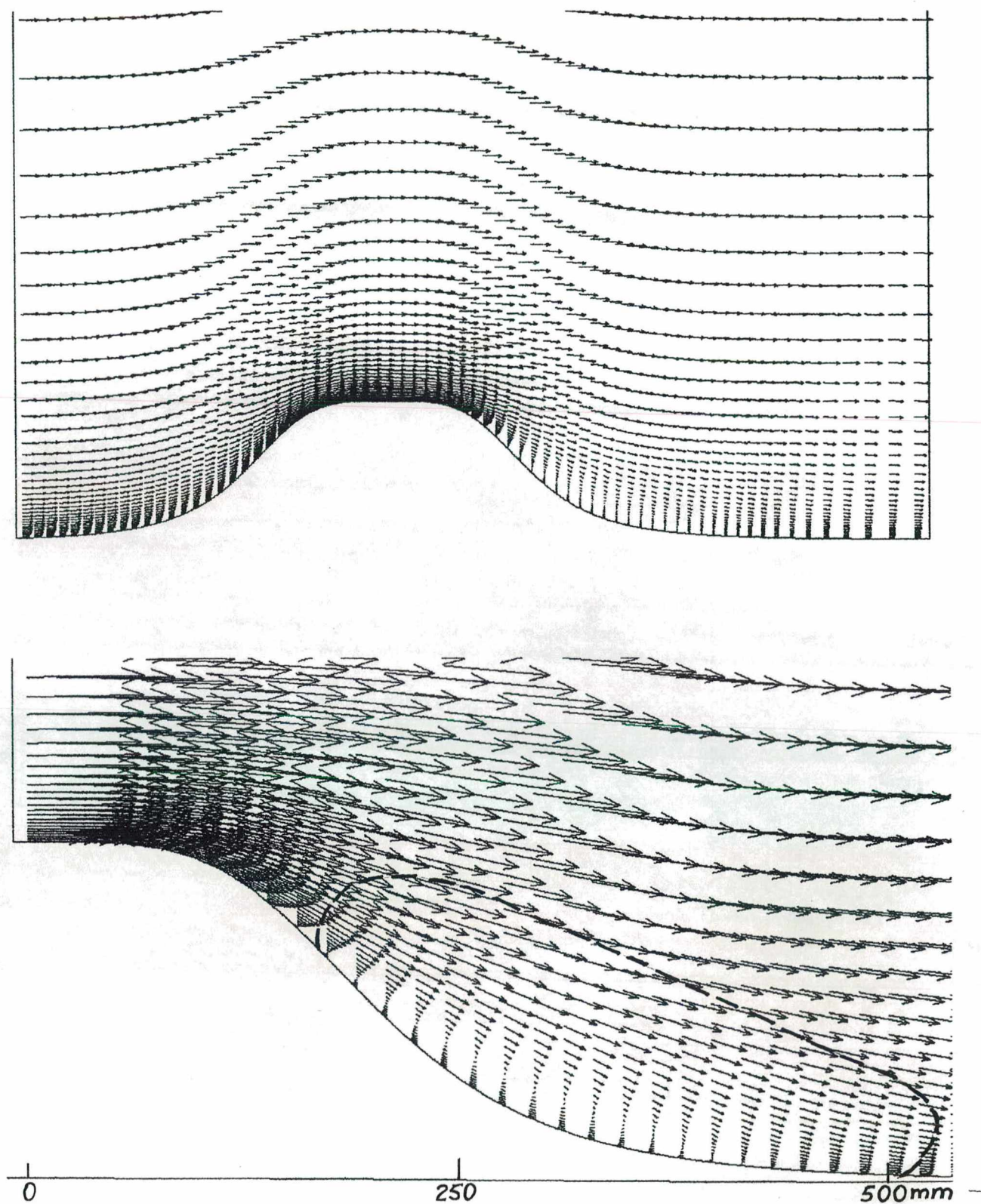


Figura 6.27 - Vetores velocidade na secção longitudinal ao longo do plano de simetria - caso E2
(Dimensão vertical exagerada. Abaixo, detalhe da região de recirculação. Em tracejado o tamanho aproximado da recirculação verificada experimentalmente)

6.7 - Resultados de Concentração

Para comparar com os resultados reportados do experimento em túnel de vento, as concentrações (c) calculadas em $\text{kg} / \text{kg}_{\text{ar}}$ são transformadas de acordo com

$$\overline{C} = \frac{U_{\infty} C}{Q} \quad (\text{m}^{-2}) \quad (6.28)$$

onde $C = \rho c$, e Q é a intensidade da fonte (kg / s).

6.7.1 - Resultados Iniciais

Os campos de velocidade e difusividade turbulenta anisotrópica (horizontal e vertical) obtidos da solução do escoamento (programa NAVIER) foram interpolados da malha em que este foi resolvido para a malha da concentração, através do programa INTERGRID (seção 4.14). O programa SMOKE (seção 4.14) foi então alimentado com os campos de velocidade e difusividades para resolver numericamente a equação da concentração (6.5). A figura 6.28 mostra os perfis verticais de concentração do caso neutro em terreno plano (D0). Percebe-se que a concordância com os valores medidos são melhores nos estágios mais afastados da fonte ($x > 200\text{mm}$). É clara a tendência do modelo numérico de promover uma exagerada dispersão da pluma no estágio inicial de seu desenvolvimento, quando ainda está relativamente próxima da fonte e possui dimensões menores. Note que essa alta difusão da pluma prevista numericamente ocorre em ambas as direções de dispersão (vertical e transversal). Poderia ser sugerido, num primeiro ímpeto, um aumento no número de Schmidt turbulento ($=0.5$), o que produziria um coeficiente de difusão turbulenta (horizontal) menor e consequentemente uma menor difusão da pluma. Essa tentativa foi feita e, como esperado, os resultados próximos da fonte (até $x=0$) melhoraram mas as concentrações nas posições mais distantes da fonte afastaram-se dos resultados experimentais. Com efeito, o aumento generalizado da difusão horizontal causou uma dispersão lateral maior da pluma, resultando num campo de concentração menor no plano de simetria. Comparações do aumento da largura lateral da pluma com dados experimentais indicam que a largura da pluma está adequadamente prevista. Desta forma, concluímos que $Sc_t = 0.5$ é adequado e que outra análise deve ser feita com relação à exagerada dispersão inicial da pluma numérica.

Passando agora para o caso estável de montanha alta (E2), na figura 6.29 estão os perfis verticais de concentração em diversas posições a jusante da fonte. Neste caso também nota-se que há uma tendência do modelo numérico de superestimar a dispersão inicial da pluma. No caso neutro (D0) esta tendência era mais acentuada devido às difusividades serem maiores em todo o escoamento. No caso E2, entretanto, devido à estratificação estável os níveis de turbulência são menores e consequentemente o são também as difusividades. Um outro problema ainda surge no caso estável. Após o topo da montanha ($x=200$ e $x=500$) o caminho previsto da pluma é diferente do verificado no túnel de vento. O modelo numérico prevê uma pluma mais próxima do solo. Isto ocorre pelo fato de que o campo de velocidades não é adequadamente determinado pelo modelo $k-\epsilon$ na região de recirculação. Esta deficiência no cálculo do escoamento foi constatada e explicada na seção 6.6. Como o tamanho da recirculação é subestimado, a pluma é convectada para baixo pelo escoamento que está descendo após passar sobre o topo da montanha. Como no experimento a recirculação é maior, o escoamento trazendo a pluma passa mais acima do solo na zona de recirculação e consequentemente o pico de concentração ocorre a uma distância maior do solo.

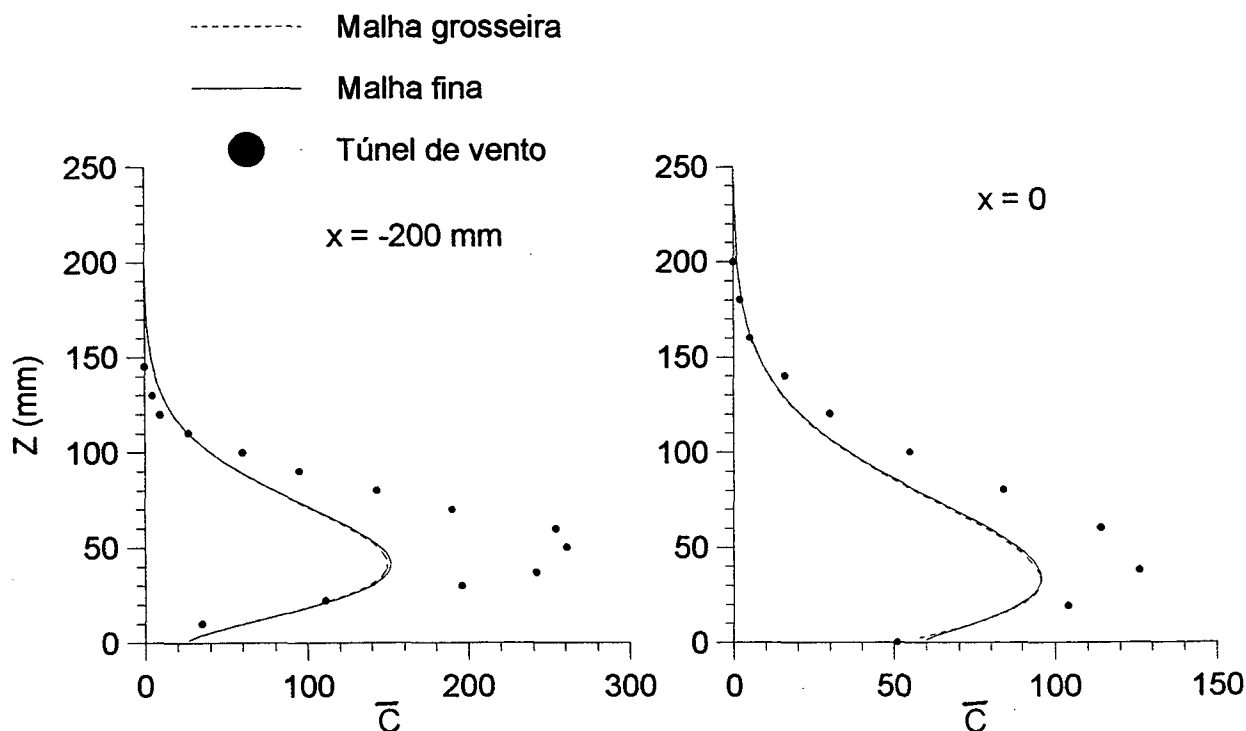


Figura 6.28 - Perfis verticais de concentração no plano de simetria - caso D0

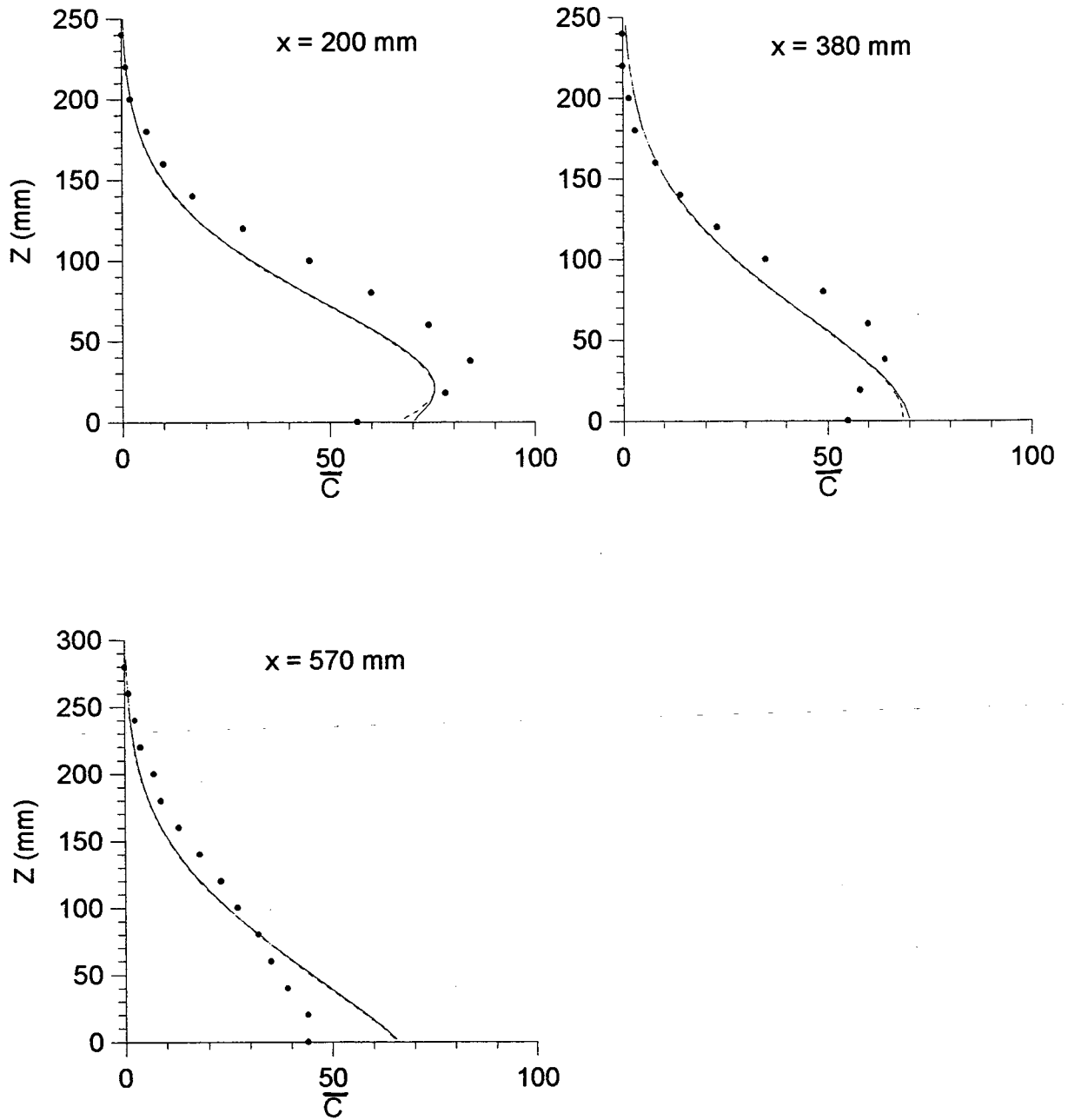


Figura 6.28 - Perfis verticais de concentração no plano de simetria - caso D0 (continuação)

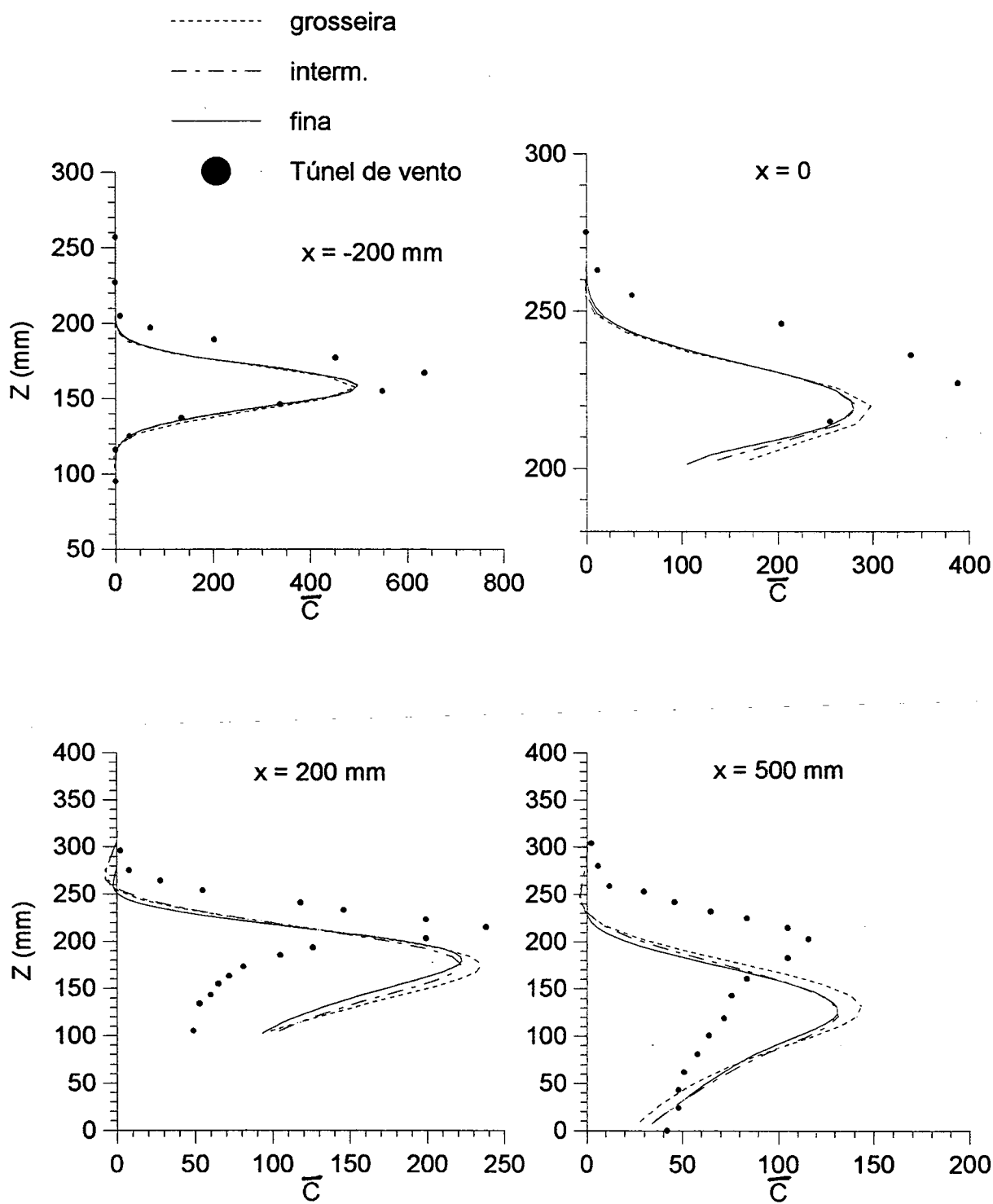


Figura 6.29 - Perfis de concentração no plano de simetria - caso E2

6.7.2 - Tratamento da Difusividade Próximo da Fonte

Na seção anterior foi constatado o problema da superestimação da difusão inicial da pluma e verificado que uma simples calibração (*tunning*) do modelo de dispersão (através de uma alteração no número de Schmidt turbulento) não resolve esta deficiência. Decidimos refletir melhor a respeito do fenômeno físico da dispersão turbulenta que acontece com a pluma quando esta ainda encontra-se com dimensões pequenas em relação ao comprimento de escala da turbulência (comprimento de mistura) do escoamento. Convém definir com alguma precisão o que é a dimensão ou largura da pluma. Panofsky e Dutton (1984) definem a largura da pluma em uma dada direção (vertical ou transversal) como sendo a distância do centro da pluma ao ponto em que a concentração é 10% de seu valor máximo (no centro da pluma). Obviamente outras frações de referência (diferentes de 10%) poderiam ser adotadas para definir a dimensão da pluma. Empregamos esta definição não só por ser a usualmente adotada na literatura, mas também porque desta forma 95% da massa da pluma está dentro dos limites de sua dimensão (supondo-se uma distribuição gaussiana).

Ao ser emitida pela fonte, a massa que forma a pluma adentra em um escoamento desenvolvido que possui um comprimento de escala característico dos vórtices turbulentos maior que a dimensão da pluma. Pelo fato de os vórtices possuírem dimensões médias (caracterizadas pelo comprimento de escala l) maiores que aquela da pluma, os mesmos não devem promover sobre a massa que inicia sua dispersão a mesma difusão turbulenta que ocorre com quantidade de movimento e energia, que possuem campos já desenvolvidos, com gradientes significativamente inferiores àqueles da concentração. Desta forma, especulamos que o comprimento de escala a ser aplicado na determinação das difusividades turbulentas de massa deve ser apropriadamente reduzido para o estágio inicial de dispersão da pluma, de acordo com as dimensões locais desta. Baseado numa distribuição gaussiana da pluma próxima da fonte (que é realístico), como uma primeira investigação, decidimos reduzir linearmente as difusividades computadas pela solução do escoamento, para serem aplicadas no cálculo da concentração. Isto é equivalente a reduzir (também linearmente) o comprimento de escala turbulento, já que a difusividade turbulenta é o produto da energia cinética turbulenta pelo comprimento característico dos vórtices (ver seção 2.4).

O procedimento para redução das difusividades turbulentas próximo da fonte consiste em tomar o valor da difusividade na posição da emissão, a partir da solução do escoamento, e aplica-lo no modelo de pluma gaussiana para dispersão de fonte pontual, para calcular a que

distância do ponto de emissão a largura da pluma é comparável ao comprimento de escala local da turbulência (também tomado na posição da fonte). Em outras palavras, na equação de difusão gaussiana, igualamos a largura da pluma ao comprimento de escala da turbulência multiplicado por um fator ainda a ser determinado (α). Da equação da difusão gaussiana (1.3) temos para a direção lateral

$$\exp\left(\frac{-u y^2}{4 K_y x}\right) = \delta_{pl} \quad (6.29)$$

onde $\delta_{pl} = 0.1$ é a fração considerada na definição da dimensão da pluma (10%) e $K_y = K_y^h$ é tomado na posição da fonte. Relacionando a largura da pluma (y em 6.29) ao comprimento de escala da turbulência linearmente por

$$y = \alpha l \quad (6.30)$$

e resolvendo (6.29) para a distância da fonte (x) temos

$$x_{mod} = \frac{-u}{16 K_y \ln \delta_{pl}} (\alpha l)^2 \quad (6.31)$$

Tomamos para u a velocidade na posição da fonte. A partir da fonte até a distância dada por 6.31 a difusividade turbulenta é modificada por

$$(K_y^h)_{mod} = \frac{x}{x_{mod}} K_y^h \quad (6.32)$$

Procedimento similar é adotado para a difusividade turbulenta vertical (K_z^h).

O valor do coeficiente α significa quantas vezes aproximadamente a pluma deve ser maior que o comprimento de escala para que esteja completamente incorporada ao escoamento turbulento. A sua determinação foi feita empiricamente através da comparação dos resultados numéricos com os valores experimentais. Pode parecer que este procedimento seja por demais arbitrário e que consista em um simples ajuste da solução aos valores medidos. De fato o seria se

a constante α assumisse valores diferentes para cada caso estudado. No entanto constatamos que $\alpha \approx 5$ é adequado para todos os seis casos de túnel de vento estudados. Este resultado nos levou a concluir que a análise física sobre a questão da relação entre o tamanho da pluma e do comprimento de escala da turbulência, discutido acima, deve ser válida pois teve corroboração favorável por meio dos casos de dispersão ora estudados.

6.7.3 - Resultados Finais

Nesta seção apresentamos os resultados de concentração obtidos com o tratamento da difusividade próximo da fonte conforme explicado na seção anterior. Nas figuras 6.30 a 6.35 são mostrados perfis verticais de concentração (no plano de simetria, $y=0$) para os seis casos estudados. Para efeito de comparação com o $k-\epsilon$ anisotrópico (e verificação de sua performance), mostramos também (para os casos D0, D1, D2 e E2) os resultados obtidos empregando-se o modelo $k-\epsilon$ clássico isotrópico. No caso E0 (figura 6.33), posição $x=200\text{mm}$, cremos que os resultados experimentais reportados estão incorretos (subestimados), a julgar pelo comportamento dos picos de concentração observados nas posições $x=0$ e $x=380\text{mm}$. Para essa posição o resultado numérico está muito mais coerente. Nos casos com montanha, a presença da recirculação, que não foi adequadamente capturada na solução do escoamento, contaminou os resultados de concentração a jusante da montanha, como foi discutido na seção 6.7.1. Nas figuras 6.36 e 6.37 são mostrados os perfis longitudinais de concentração máxima ao nível do solo.

Para uma melhor visualização da dispersão das plumas, as figuras 6.38 a 6.46 apresentam isolinhas de concentração (transformada conforme 6.28) onde se pode comparar os resultados numéricos com os experimentais medidos no túnel de vento. Nas figuras 6.38 a 6.40 são mostradas, respectivamente para os casos E0, D1 e E2, as isolinhas de concentração ao nível do solo. Da mesma forma, as figuras 6.41 a 6.43 mostram isolinhas de concentração no plano vertical de simetria ($y = 0$) e as figuras 6.44 a 6.46 apresentam as isolinhas de concentração no plano transversal ao escoamento, sobre o topo da montanha ($x = 0$). A intenção é a de mostrar os resultados numéricos e experimentais (os quais foram extraídos do relatório da Mitsubishi Heavy Ind.) numa mesma escala de distâncias, a fim de permitir a comparação direta dos mesmos.

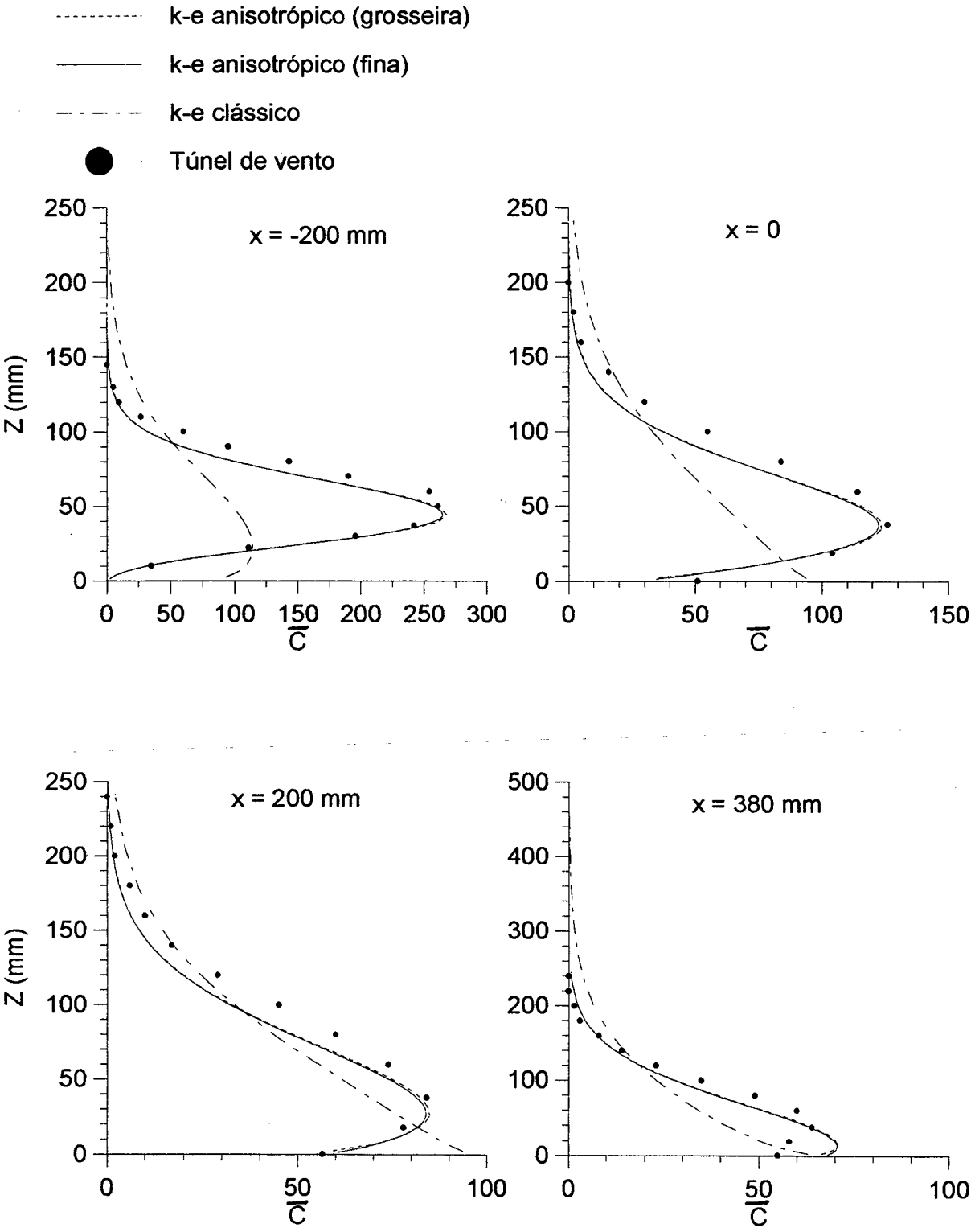


Figura 6.30 - Perfis verticais de concentração no plano de simetria - caso D0

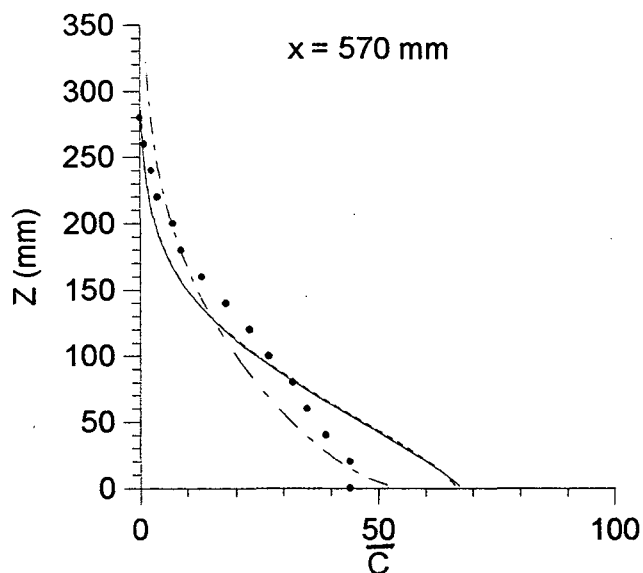


Figura 6.30 - Perfis verticais de concentração no plano de simetria - caso D0 (continuação)

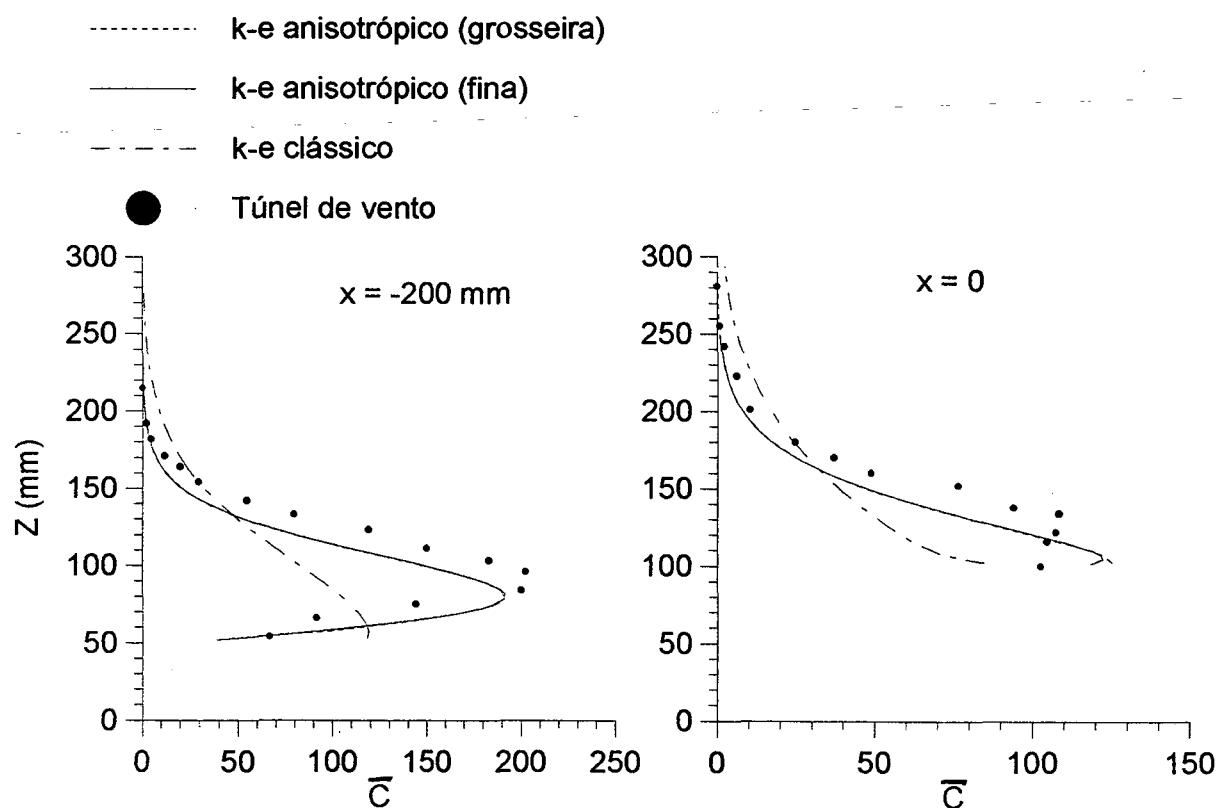


Figura 6.31 - Perfis verticais de concentração no plano de simetria - caso D1

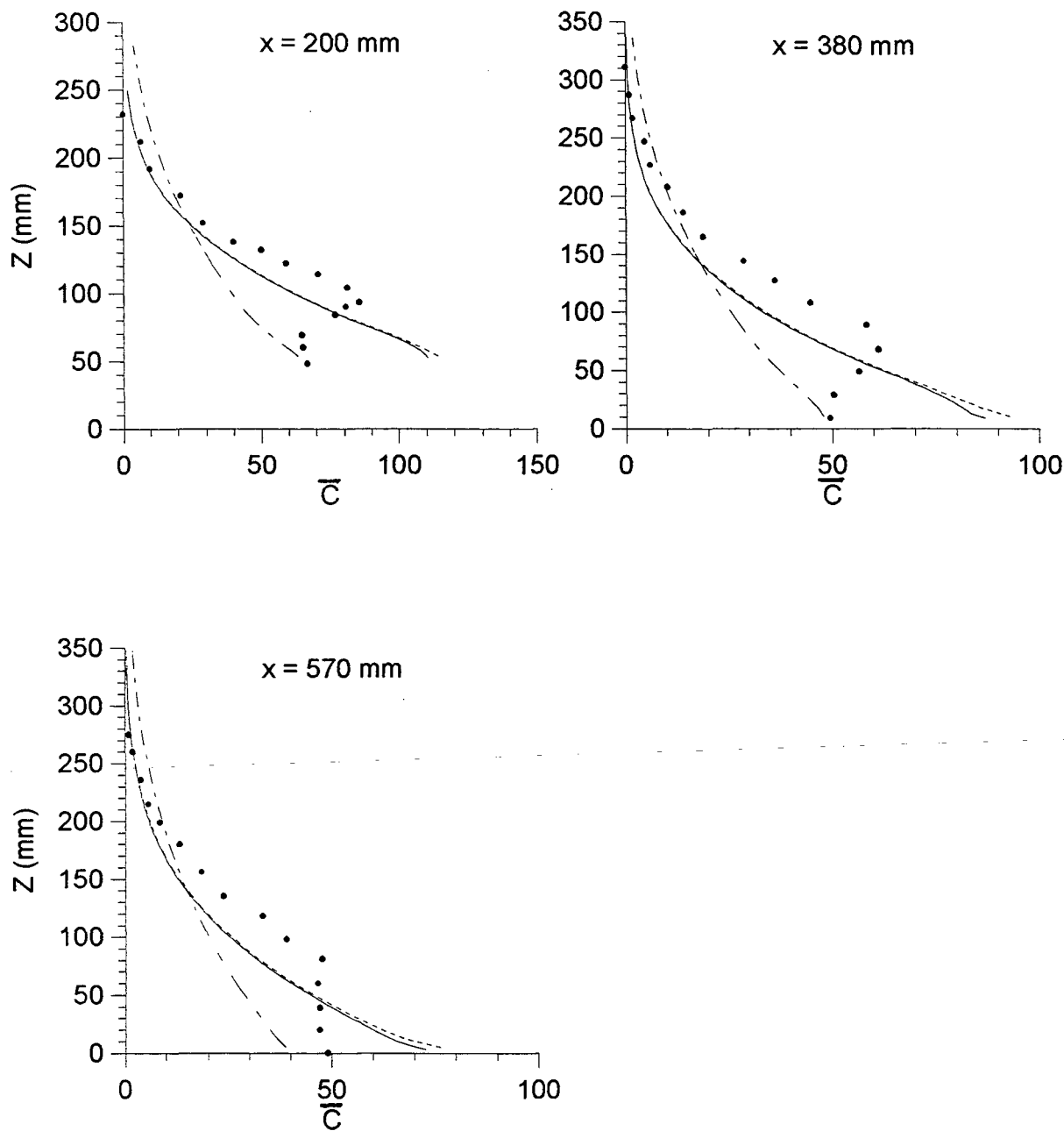


Figura 6.31 - Perfis verticais de concentração no plano de simetria - caso D1 (continuação)

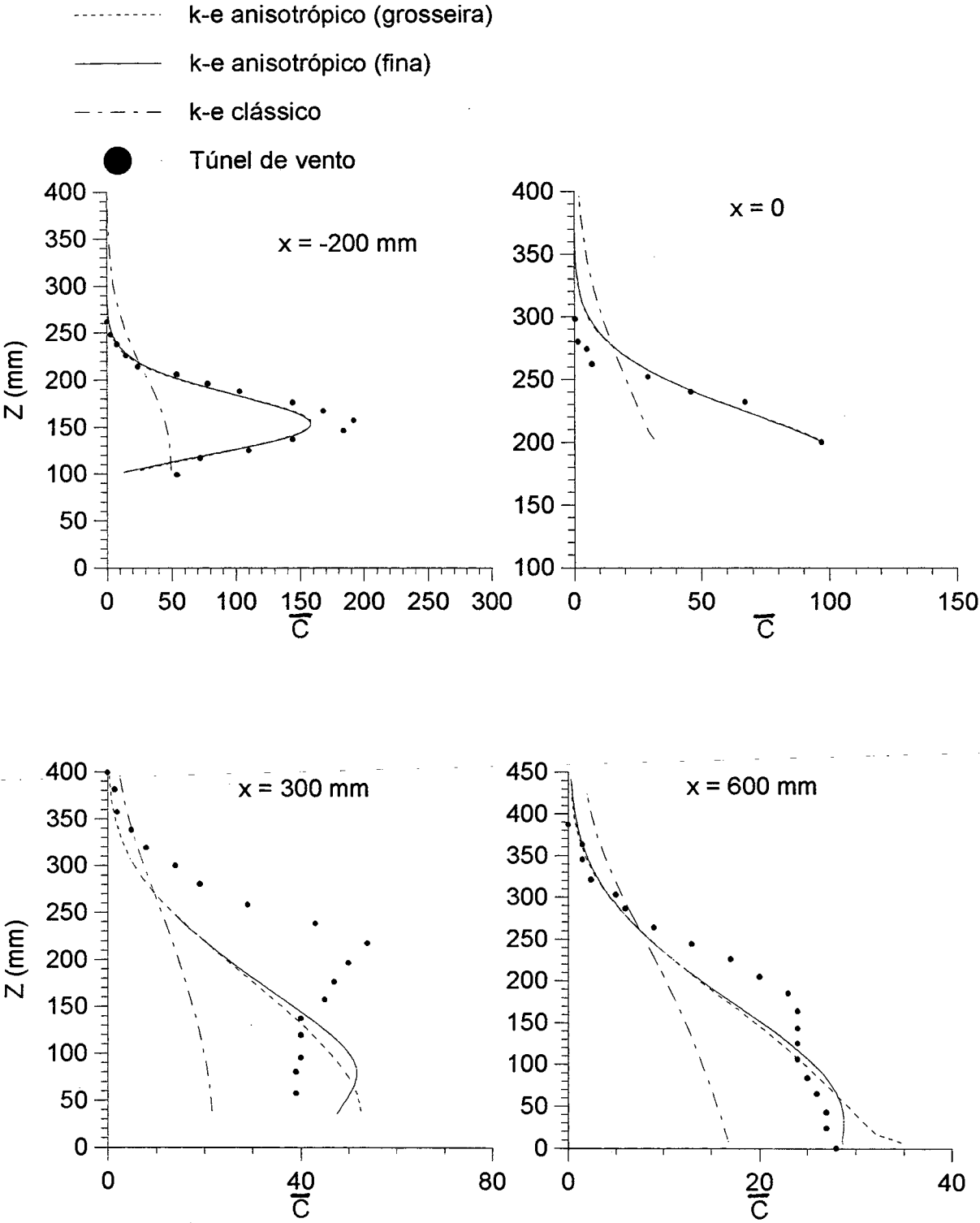


Figura 6.32 - Perfis verticais de concentração no plano de simetria - caso D2

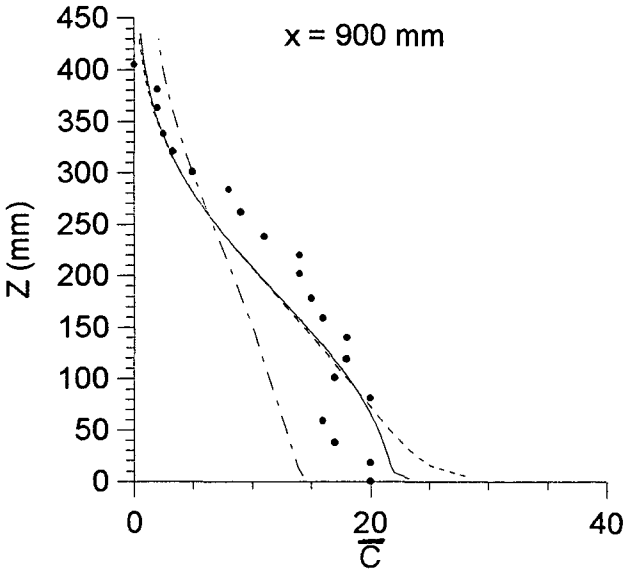


Figura 6.32 - Perfis verticais de concentração no plano de simetria - caso D2 (continuação)

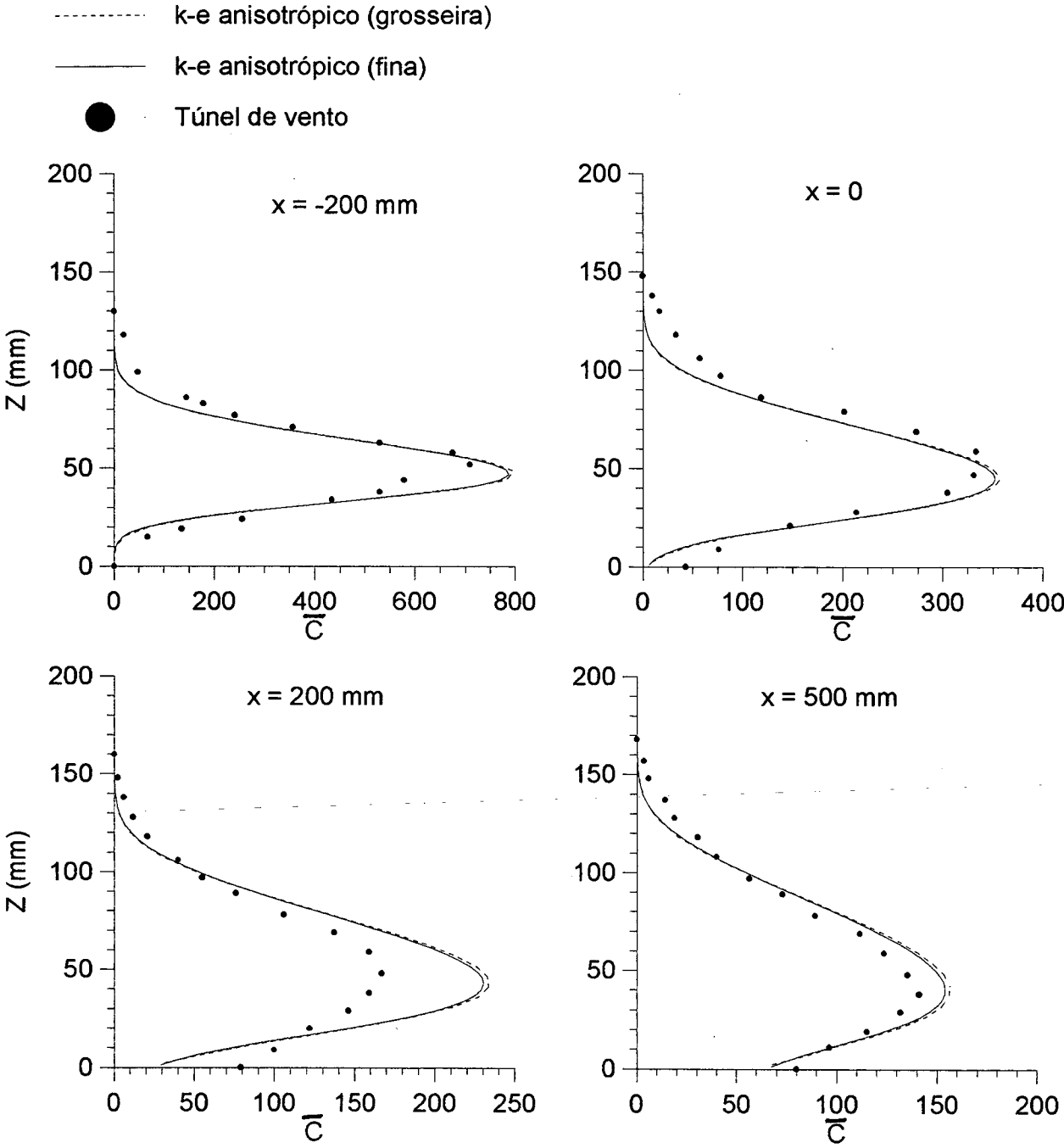


Figura 6.33 - Perfis verticais de concentração no plano de simetria - caso E0

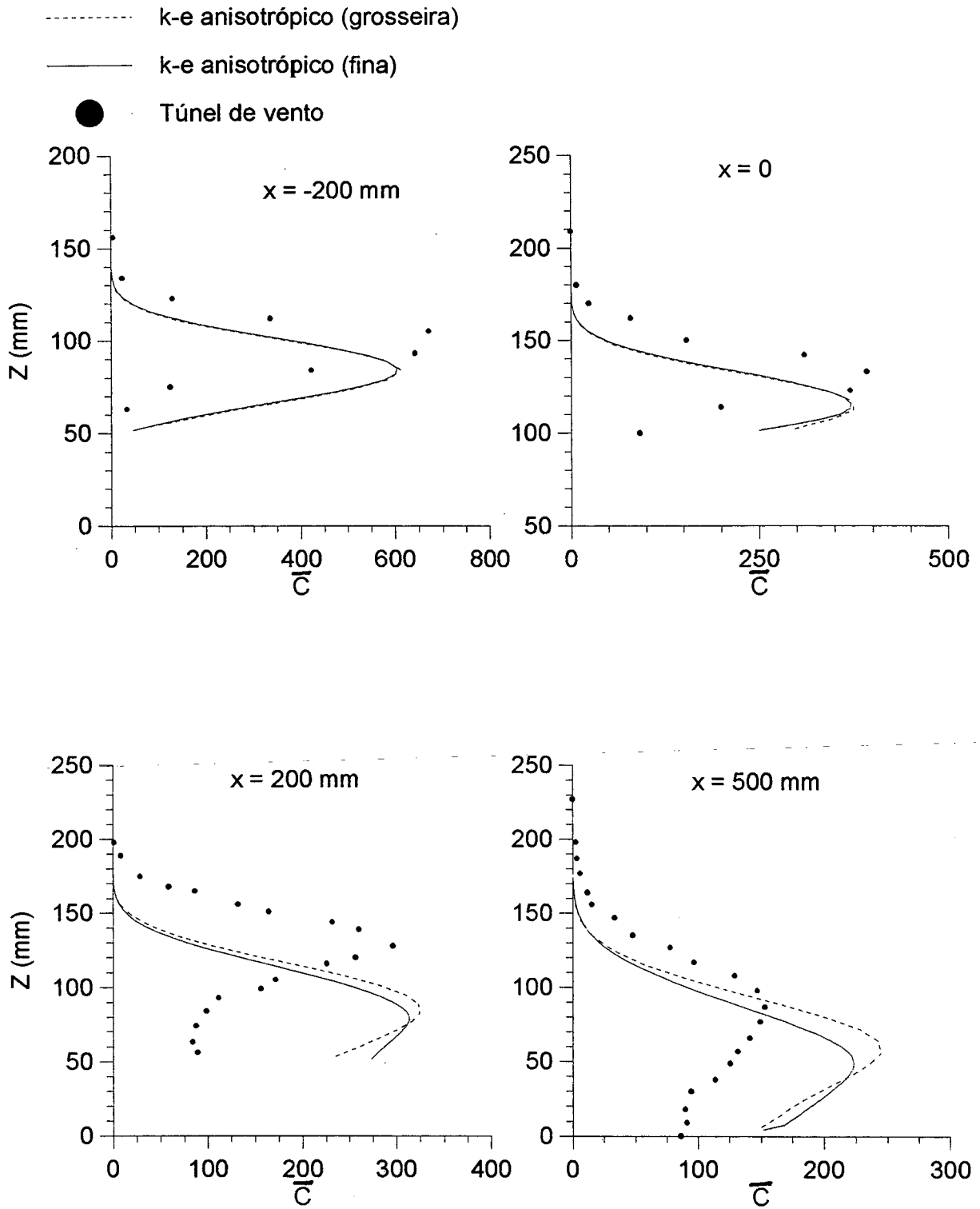


Figura 6.34 - Perfis verticais de concentração no plano de simetria - caso E1

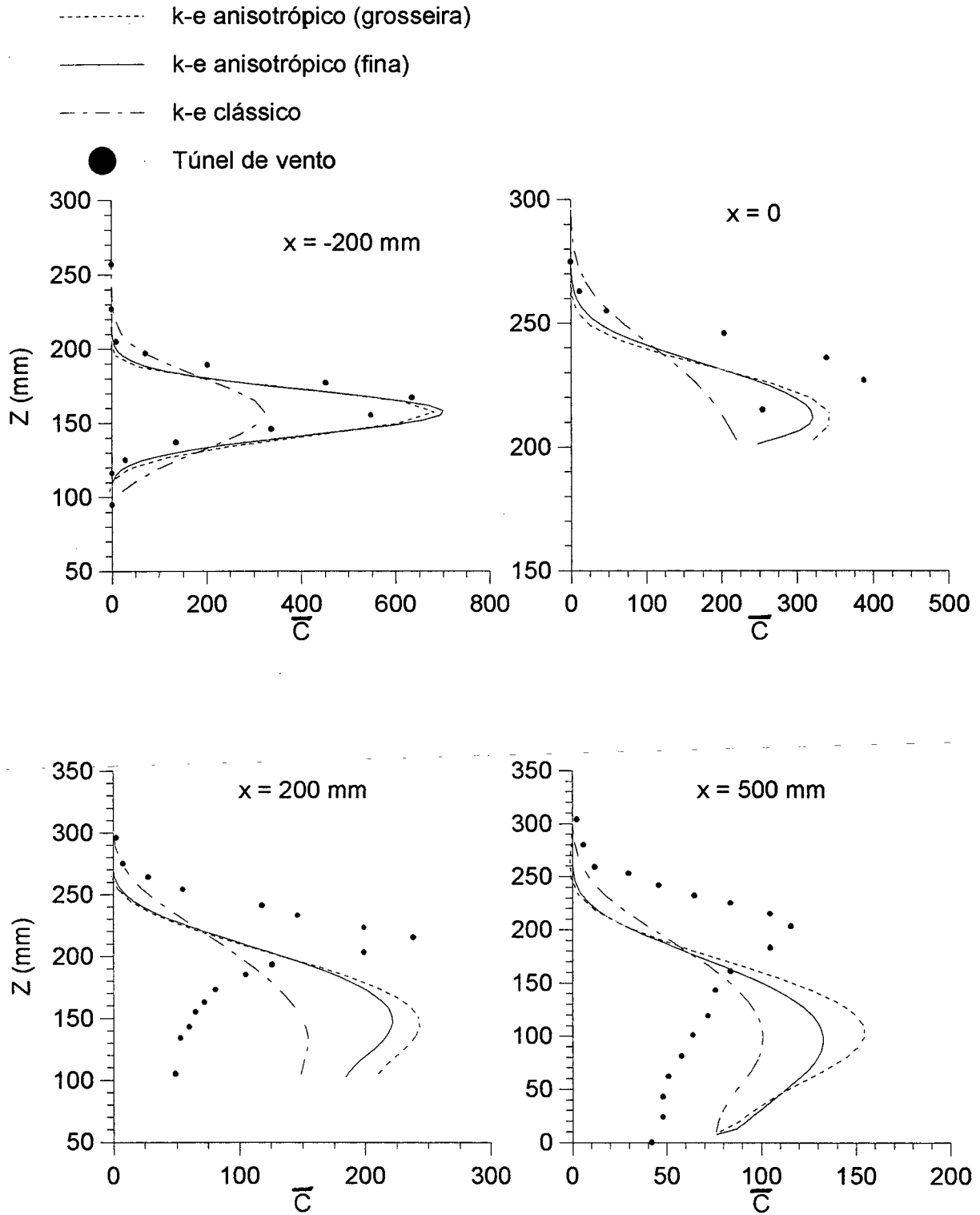


Figura 6.35 - Perfis verticais de concentração no plano de simetria - caso E2

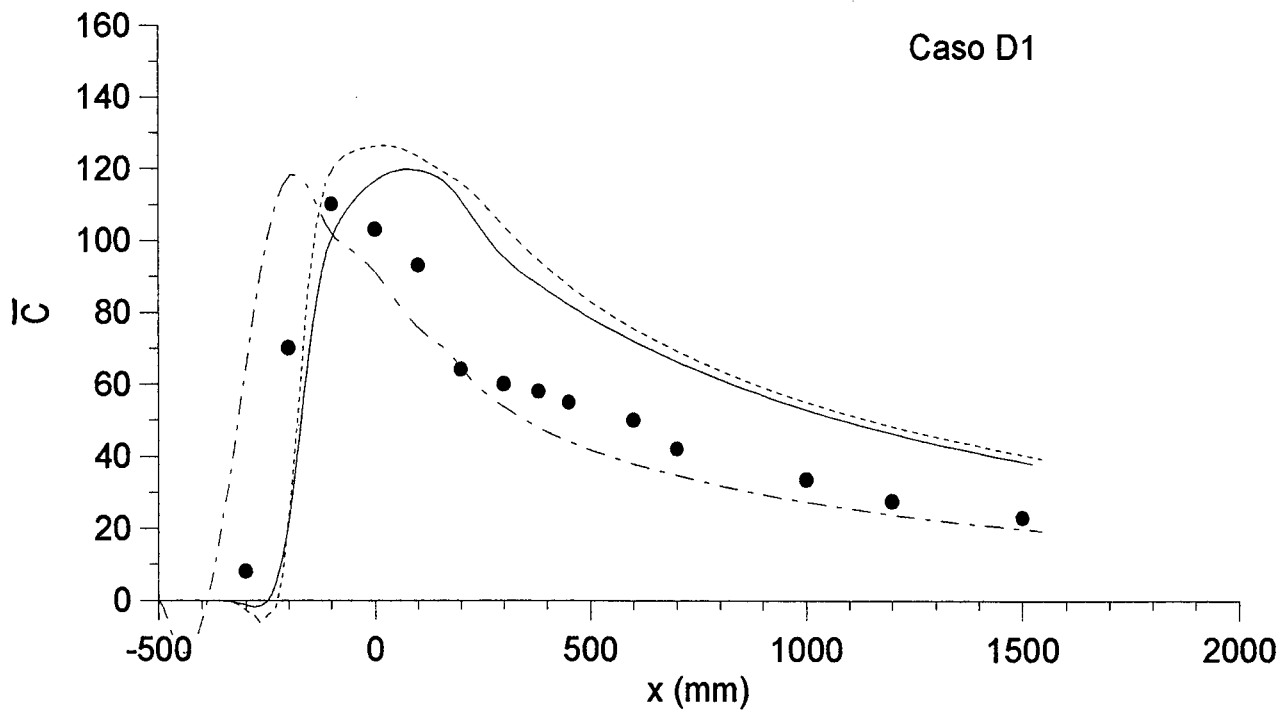
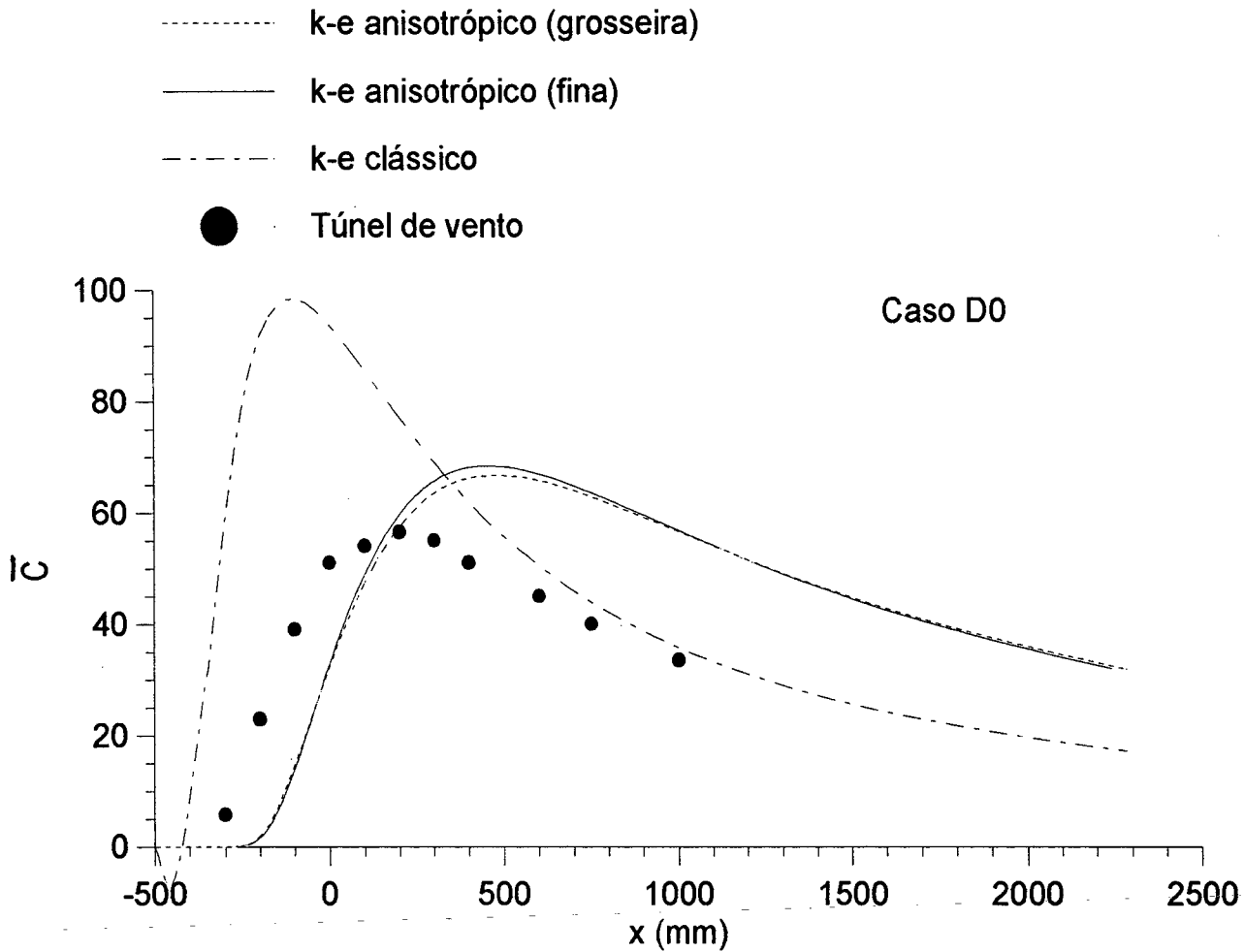


Figura 6.36 - Máxima concentração ao nível do solo
casos D0 (acima) e D1 (abaixo)

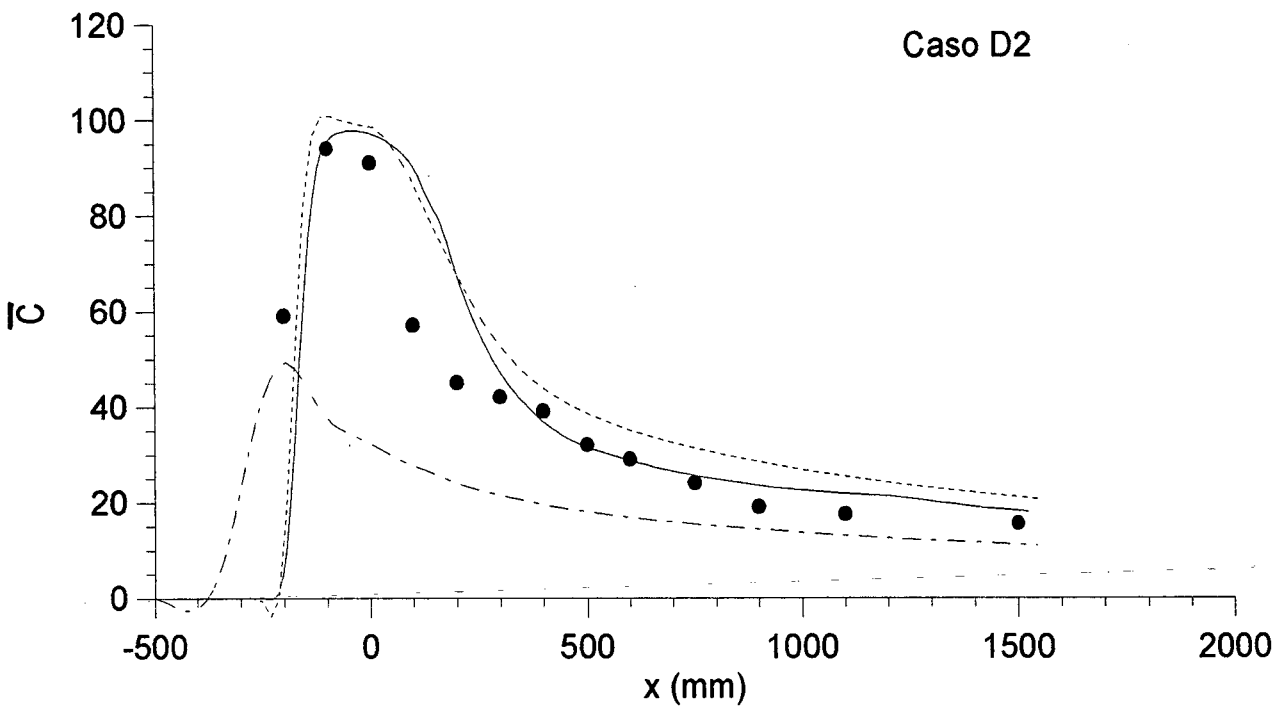


Figura 6.36 - (continuação) - Caso D2

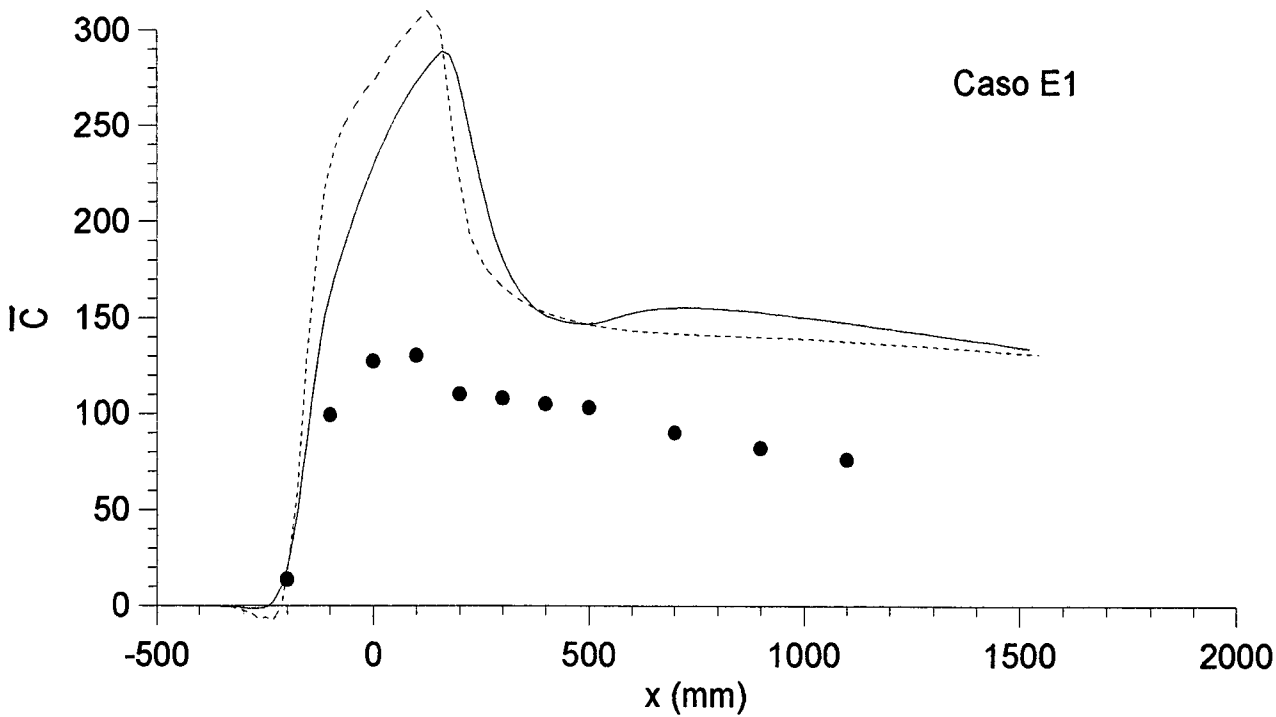
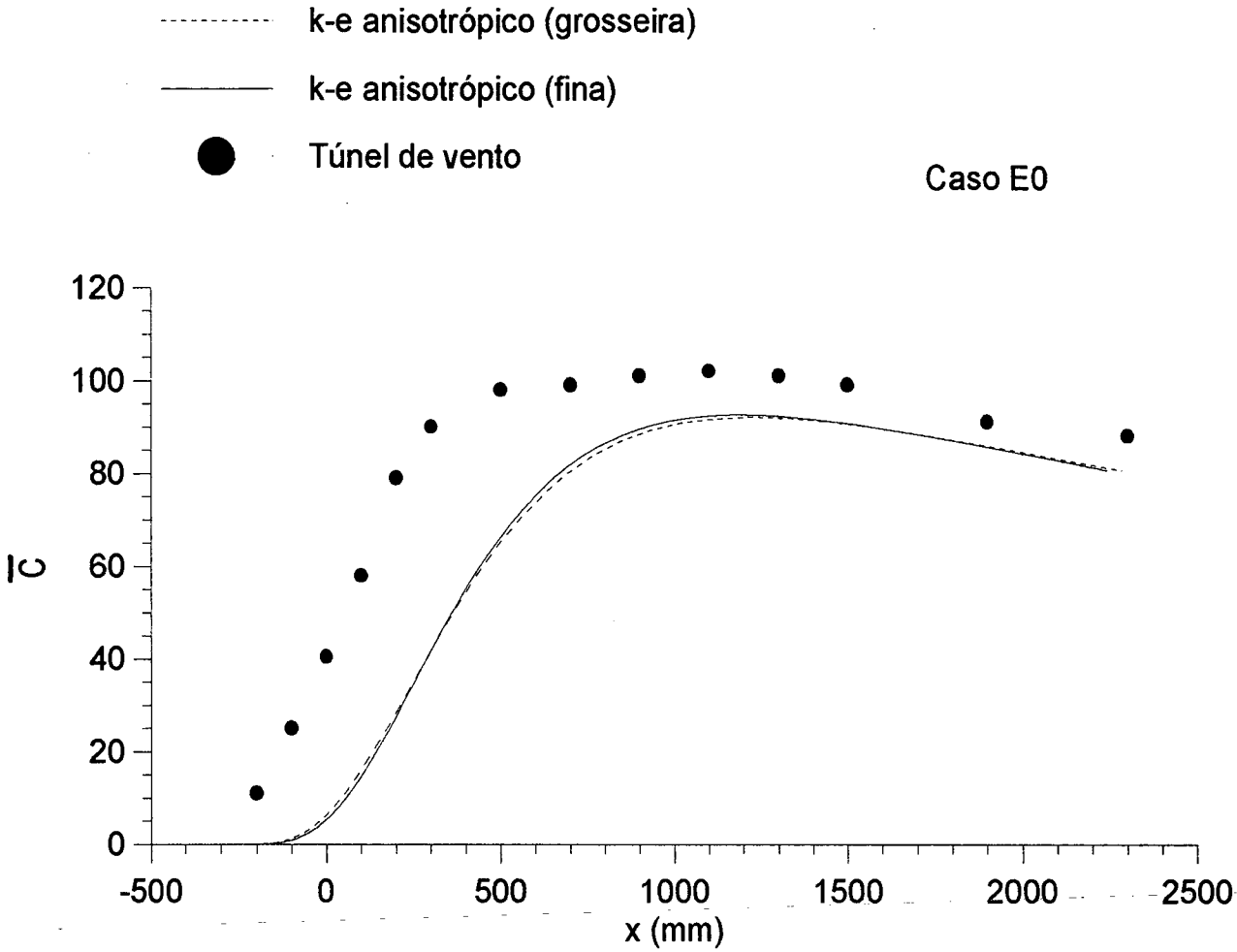


Figura 6.37 - Máxima concentração ao nível do solo
casos E0 (acima)e E1 (abaixo)

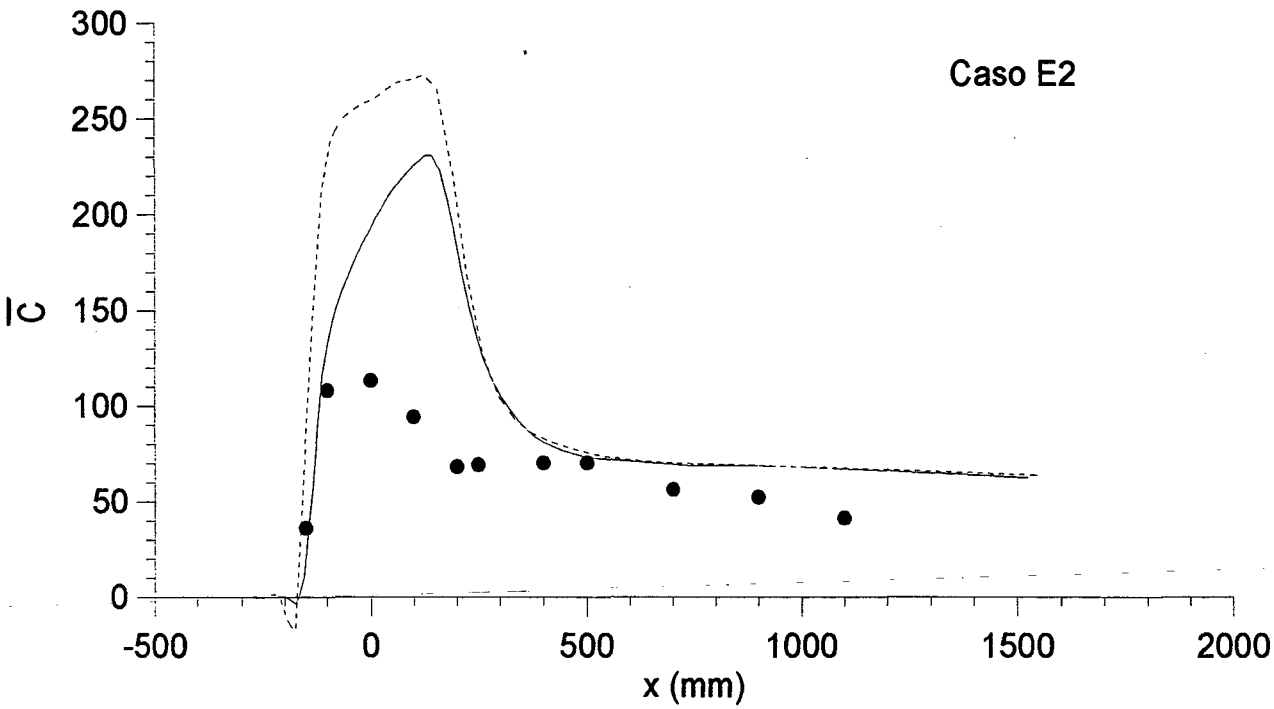


Figura 6.37 - (continuação) - Caso E2

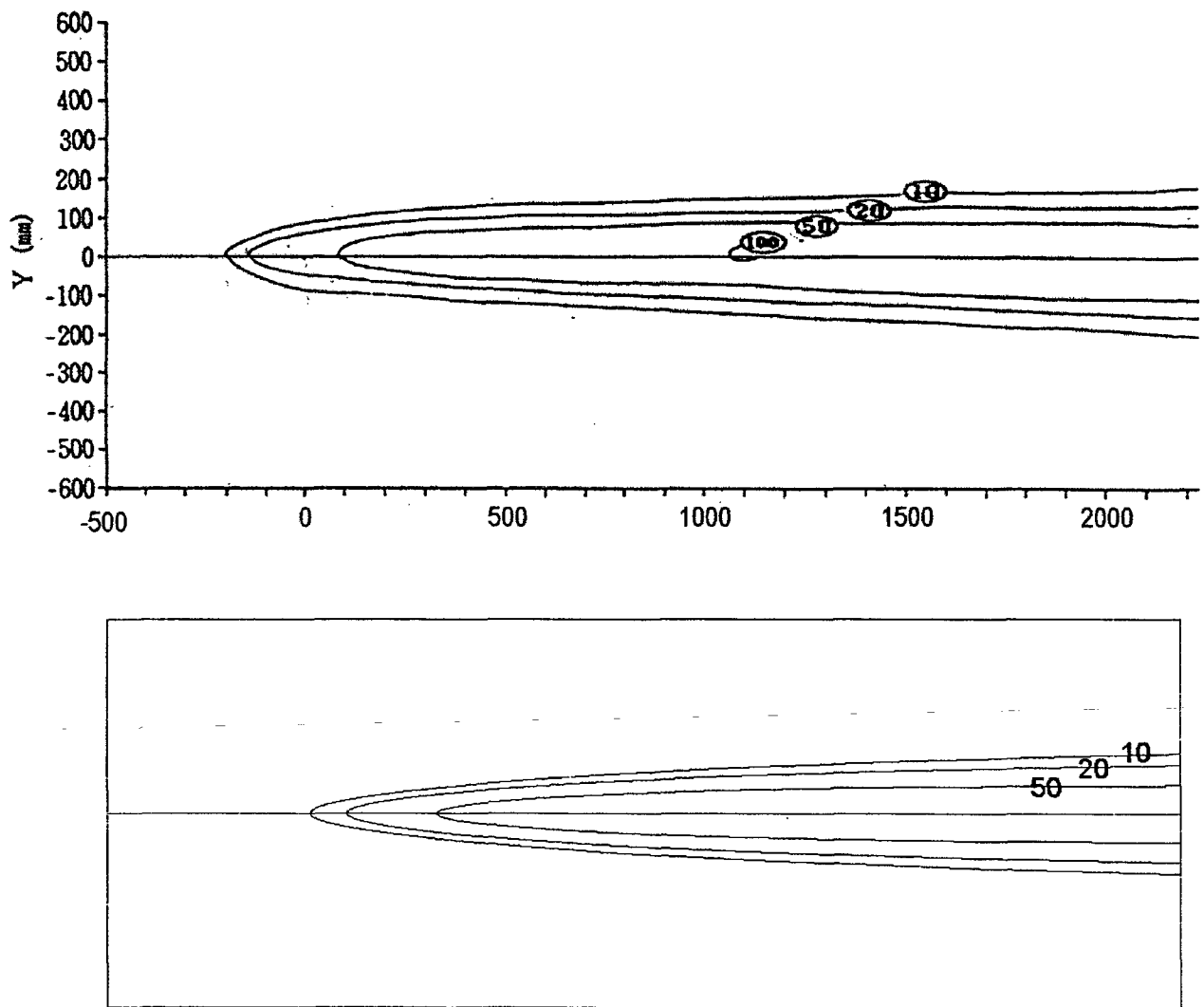


Figura 6.38 - Isolinhas de concentração ao nível do solo - caso E0 - experimental (acima) e numérico (abaixo)

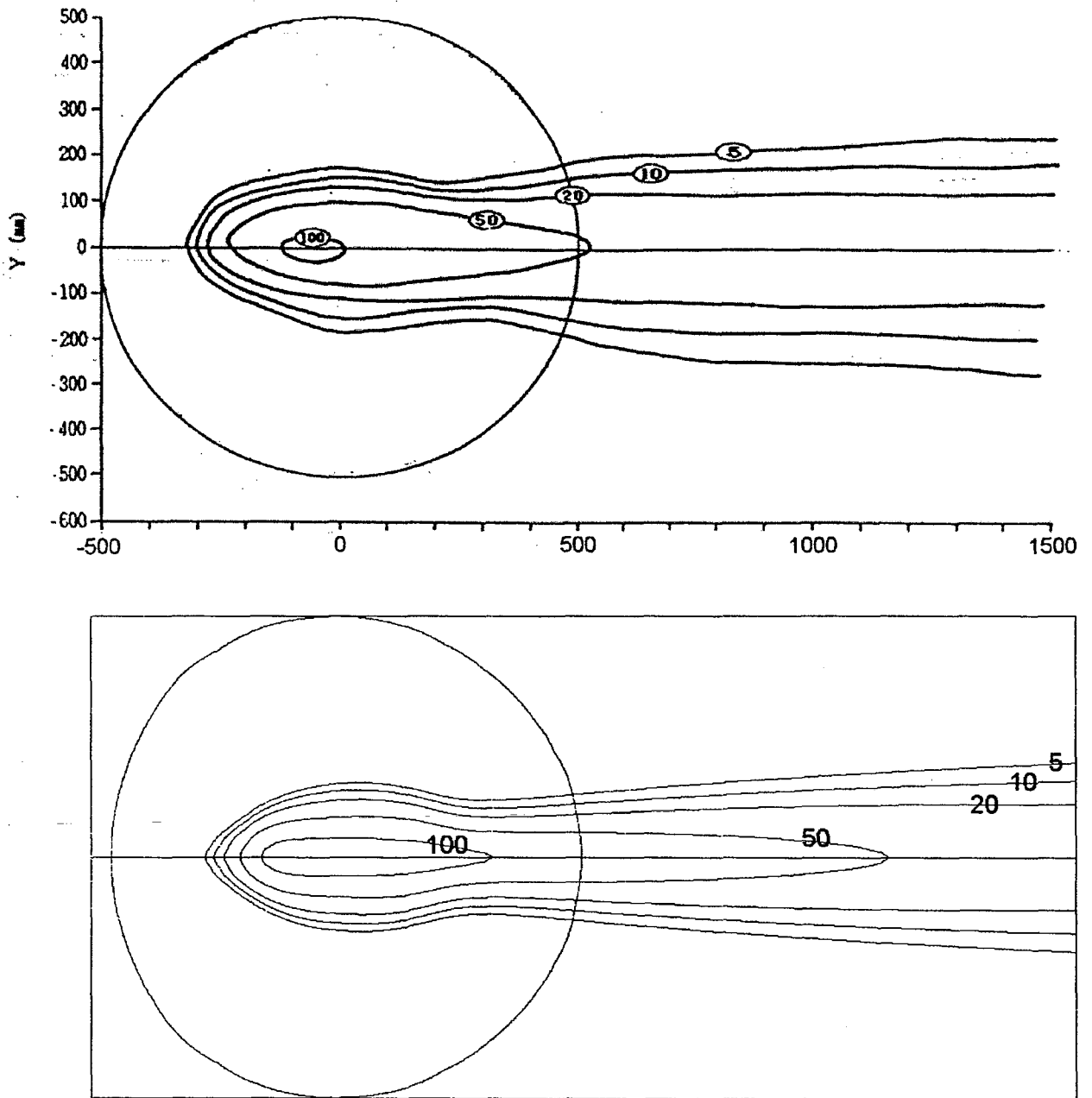


Figura 6.39 - Isolinhas de concentração ao nível do solo - caso D1 - experimental (acima) e numérico (abaixo)

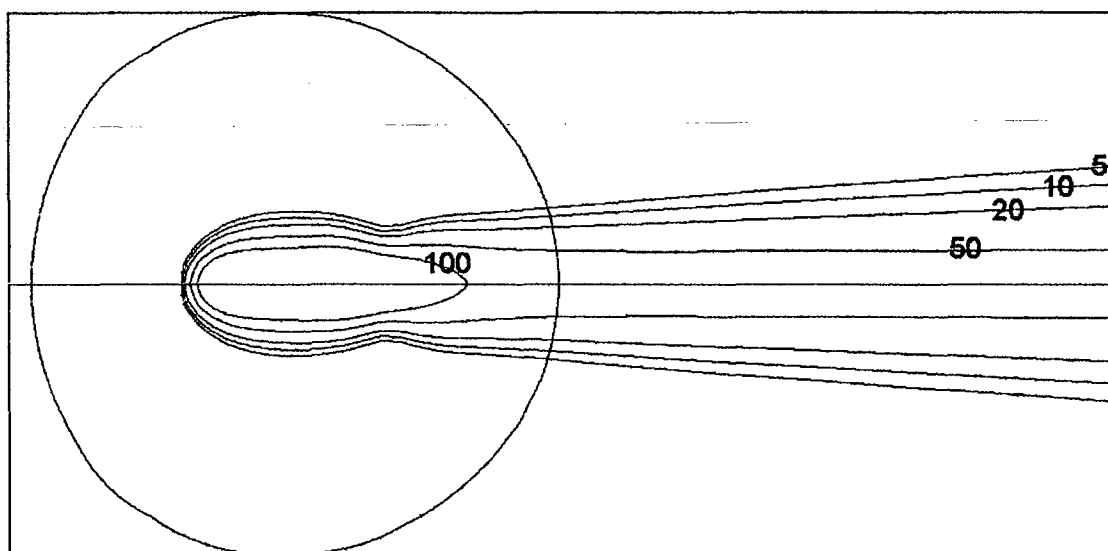
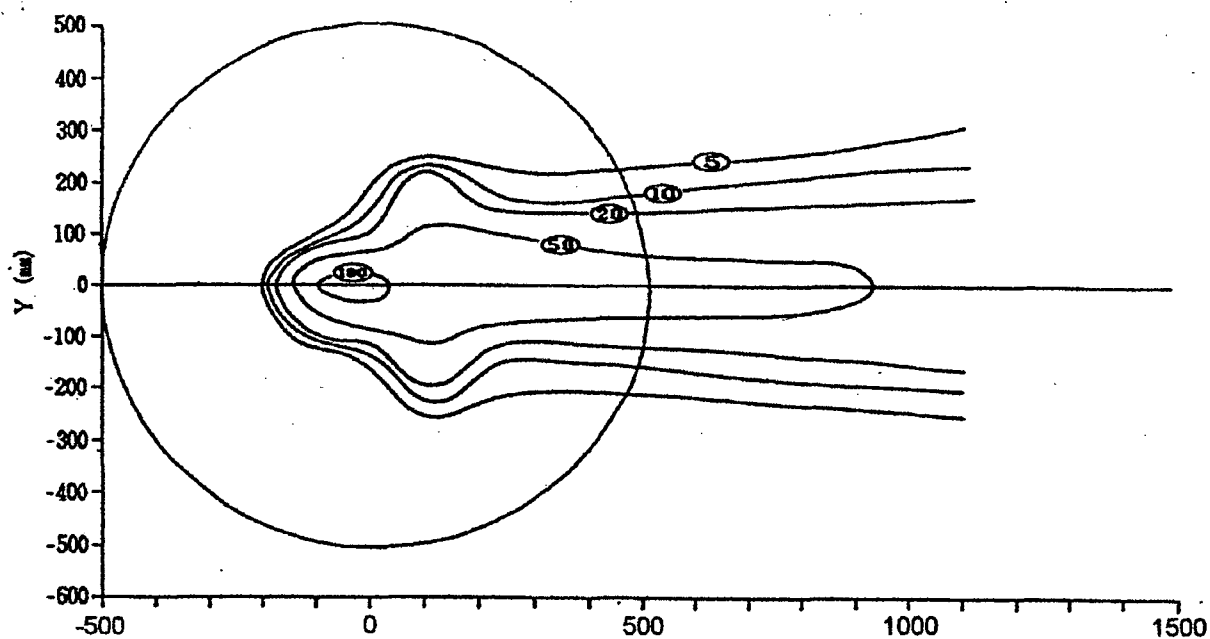


Figura 6.40 - Isolinhas de concentração ao nível do solo - caso E2 - experimental (acima) e numérico (abaixo)

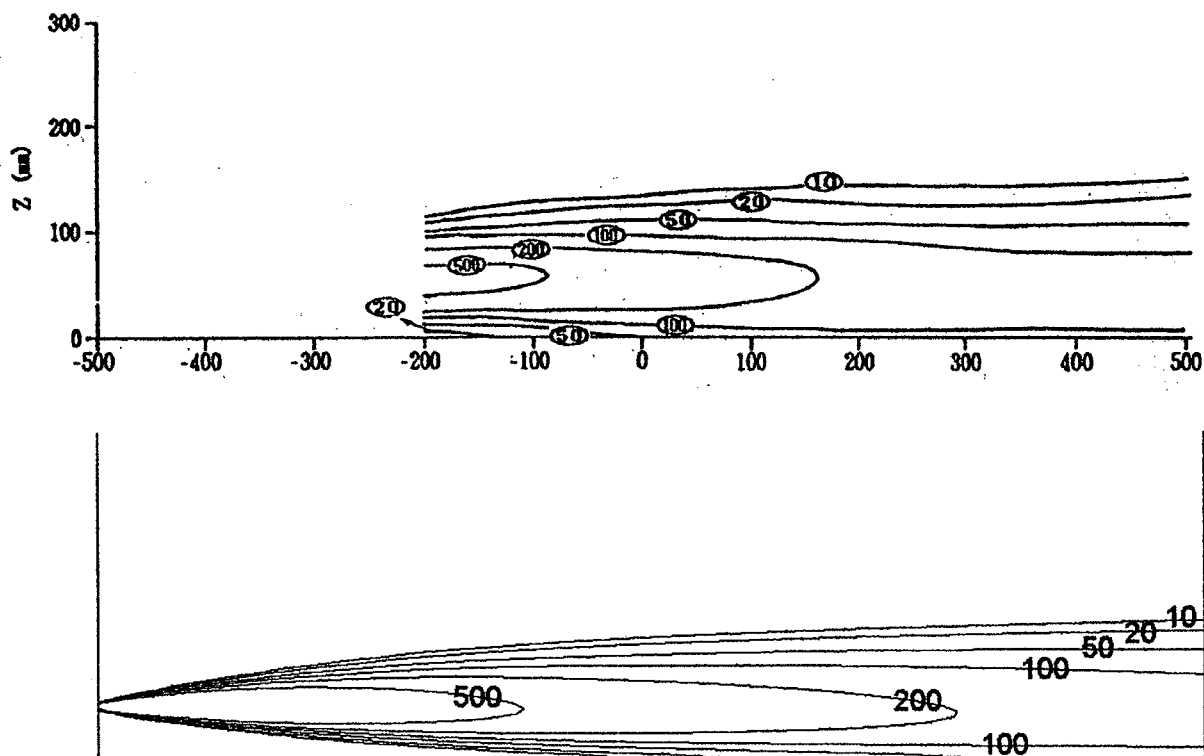


Figura 6.41 - Isolinhas de concentração no plano vertical de simetria - caso E0 - experimental (acima) e numérico (abaixo)

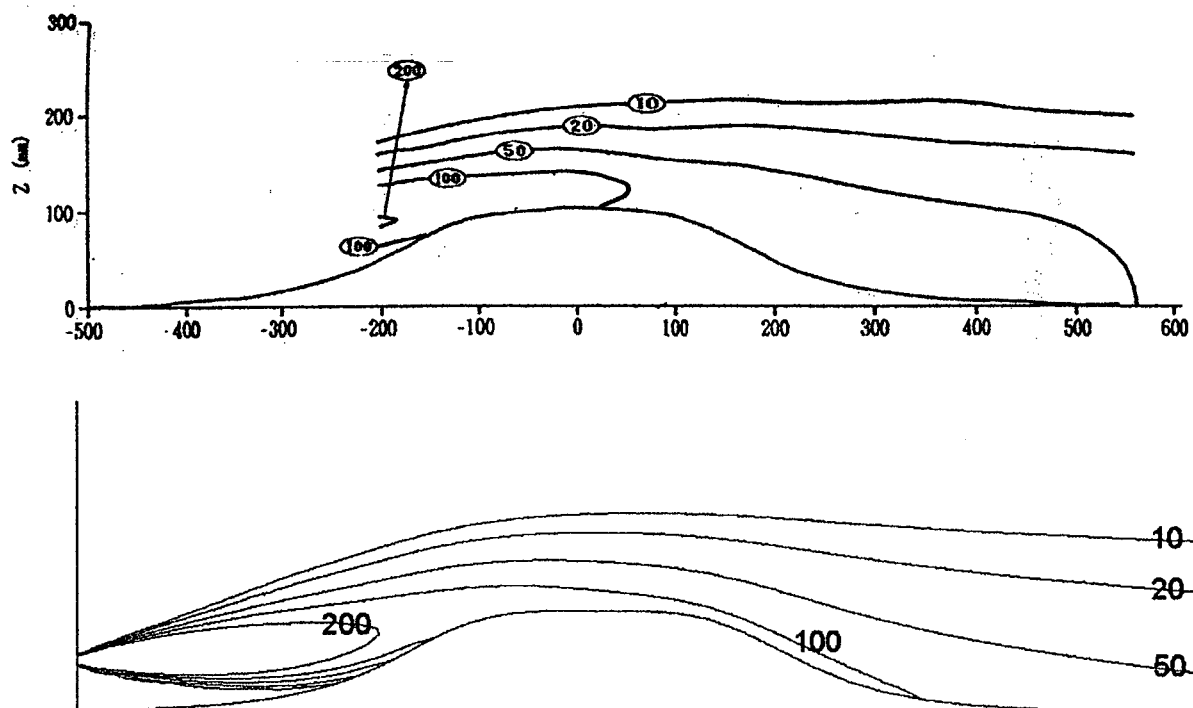


Figura 6.42 - Isolinhas de concentração no plano vertical de simetria - caso D1 - experimental (acima) e numérico (abaixo)

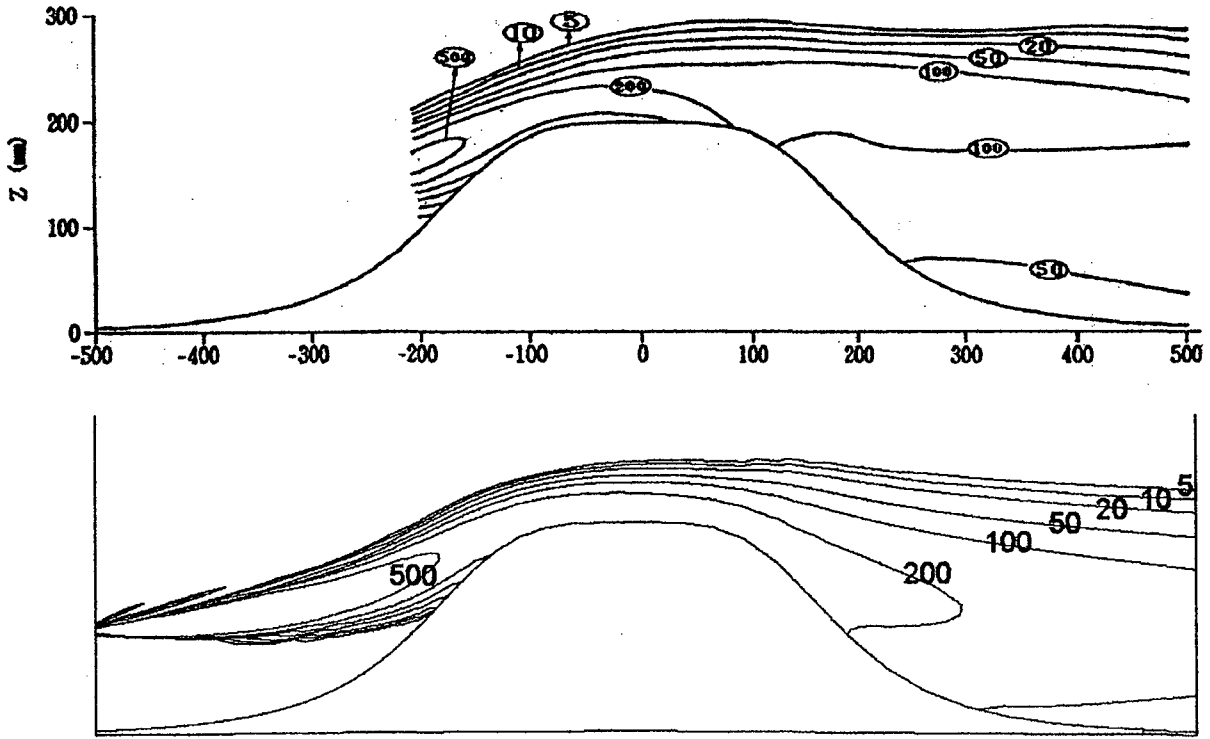


Figura 6.43 - Isolinhas de concentração no plano vertical de simetria - caso E2 - experimental (acima) e numérico (abaixo)

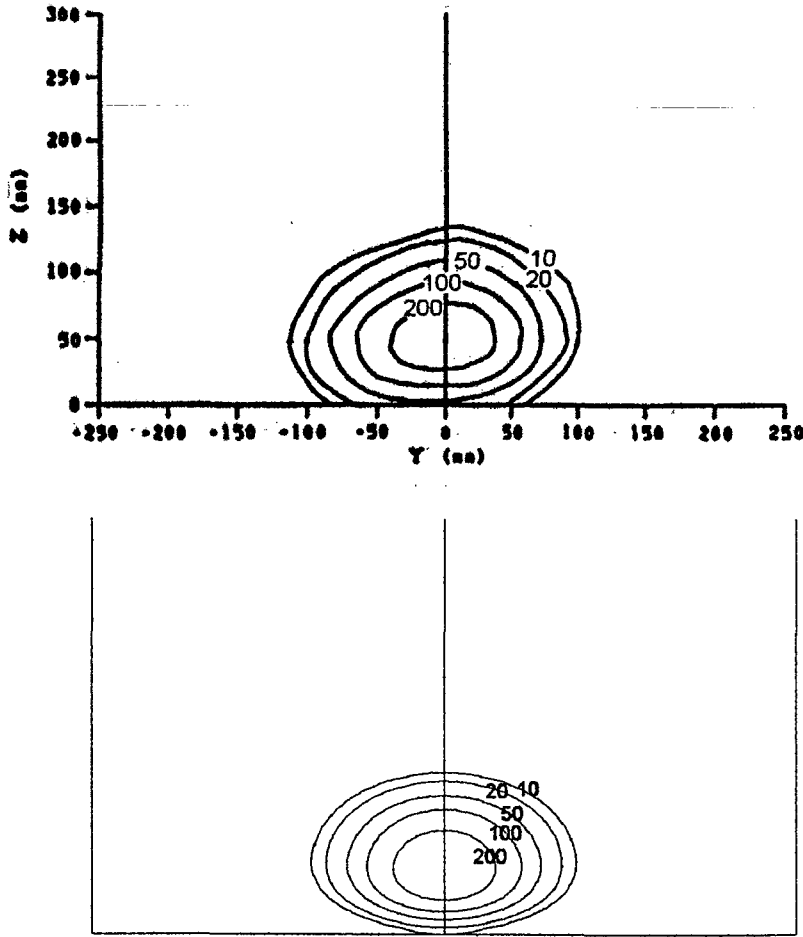


Figura 6.44 - Isolinhas de concentração no plano vertical transversal ($x = 0$) - caso E0 - experimental (acima) e numérico (abaixo)

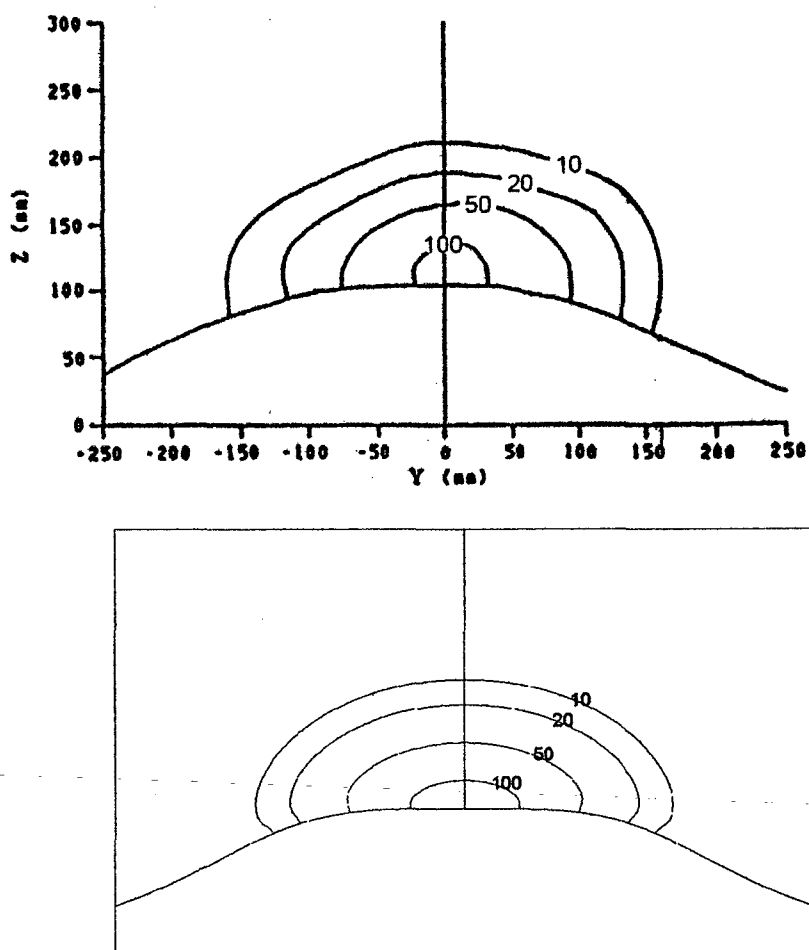


Figura 6.45 - Isolinhas de concentração no plano vertical transversal sobre o topo da montanha ($x = 0$) - caso D1 - experimental (acima) e numérico (abaixo)

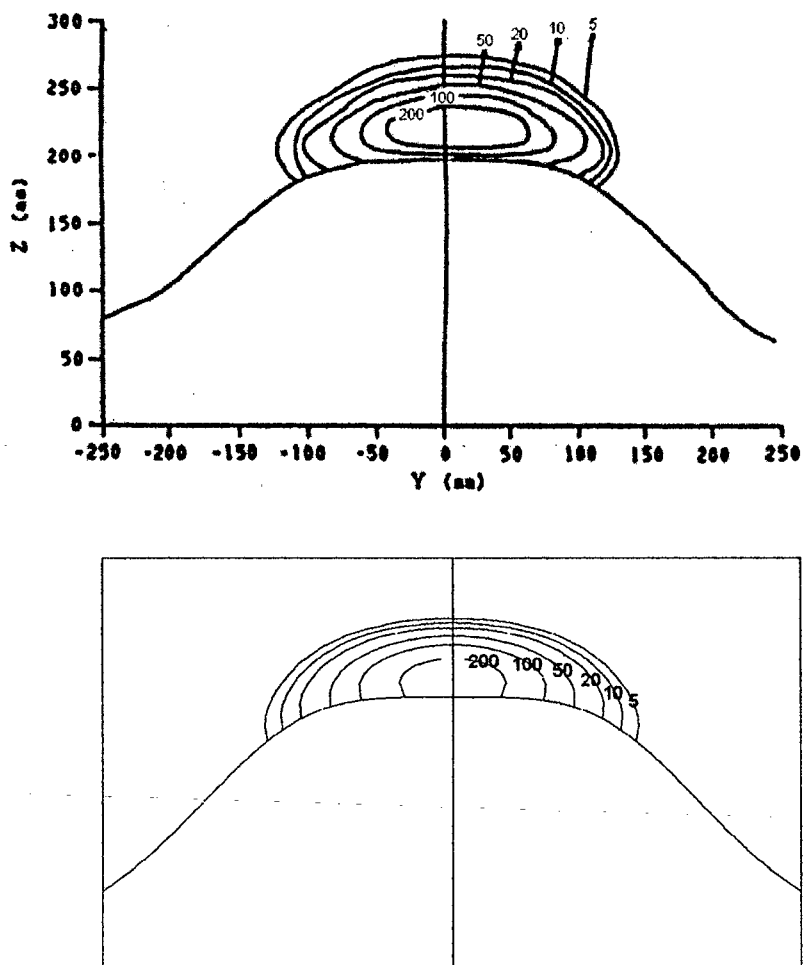


Figura 6.46 - Isolinhas de concentração no plano vertical transversal sobre o topo da montanha ($x = 0$) - caso E2 - experimental (acima) e numérico (abaixo)

Para finalizar esta seção de resultados, as figuras 6.47, 6.48 e 6.49 mostram, respectivamente para os casos D1, E1, e E2, os campos de concentração ao nível do solo e no plano de simetria obtidos numericamente. Comparando as figuras 6.47 e 6.48 é interessante notar a diferença entre a dispersão sofrida pela pluma em atmosfera neutra (caso D1), que é maior, e em atmosfera estável (caso E1) sobre a mesma topografia (montanha de 100 mm) e mesma velocidade de referência a montante da fonte ($U_{\infty} = 1.0$ m/s).

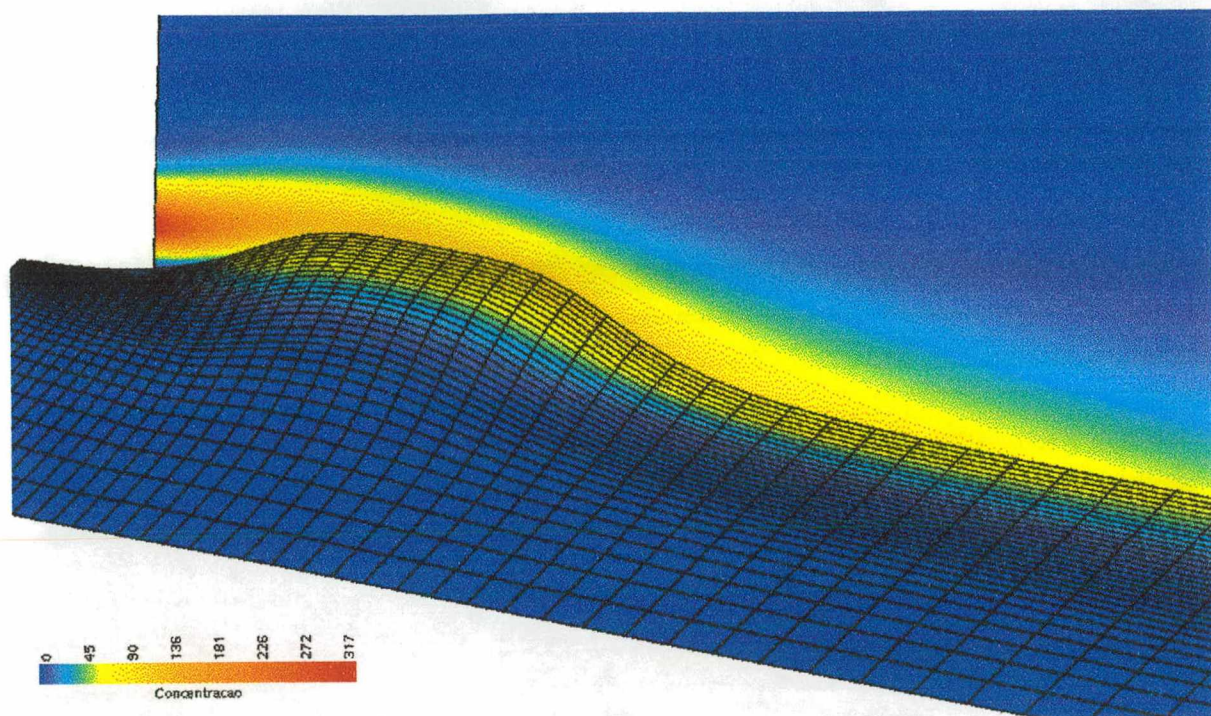


Figura 6.47 - Campo de concentração (\bar{C}) ao nível do solo e no plano de simetria - caso D1

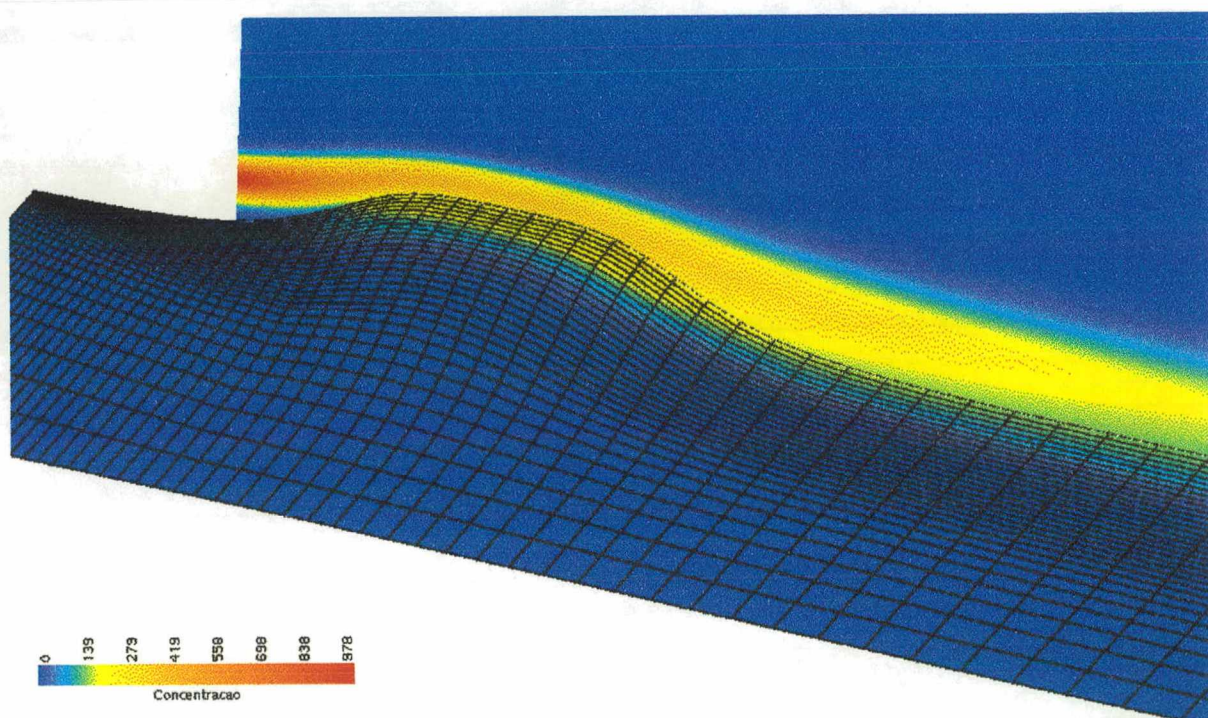


Figura 6.48 - Campo de concentração (\bar{C}) ao nível do solo e no plano de simetria - caso E1

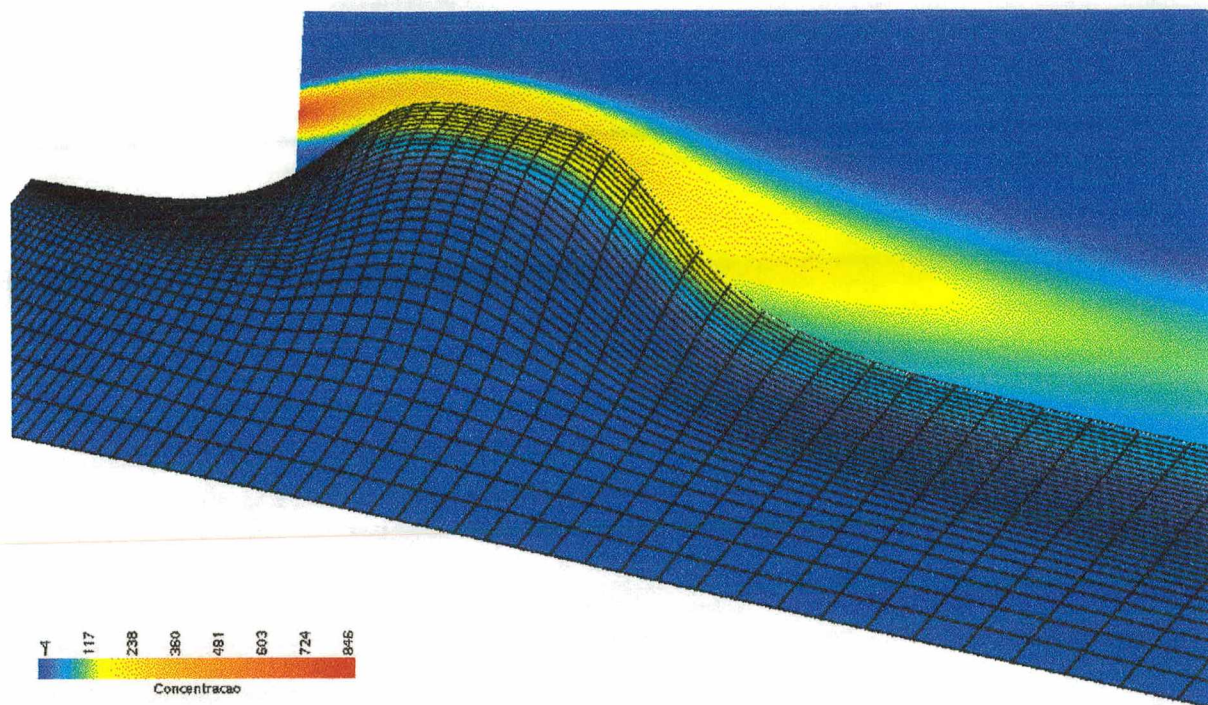


Figura 6.49 - Campo de concentração (\bar{C}) ao nível do solo e no plano de simetria - caso E2

6.8 - Resumo do Capítulo

Neste capítulo o modelo numérico é aplicado à simulação de um experimento de dispersão em laboratório (utilizando túnel de vento), e os resultados numéricos são comparados com os dados experimentais. Com relação à solução numérica, são comparados os esquemas de interpolação WUDS e QUICK, concluindo-se que o emprego do WUDS para a solução do escoamento é suficiente, mas o esquema de mais alta ordem (QUICK) é necessário para a solução da equação da concentração, devido à significativa diminuição de falsa difusão (numérica). É também analisada a influência do refino de malha na precisão da solução, através de um estimador de erro da solução numérica, o GCI (*Grid Convergence Index*). Na solução do escoamento, são comparados os resultados obtidos com o modelo k - ϵ anisotrópico e o k - ϵ clássico (isotrópico), concluindo-se que para escoamento neutro os resultados são muito parecidos, e para escoamento estável as diferenças, embora um pouco maiores, não são significativas. Já, para a solução da concentração, os resultados obtidos com o k - ϵ anisotrópico são muito melhores que aqueles obtidos com o modelo clássico. Também com relação à dispersão da pluma, foi constatada no modelo numérico a deficiência do

mesmo em superestimar as difusividades turbulentas próximo da fonte. Este comportamento dos resultados foi analisado, uma explicação baseada na física da turbulência foi fornecida para esta deficiência do modelo, e um tratamento adequado para as difusividades turbulentas a serem aplicadas na equação da concentração - na região próxima da fonte - foi proposto. Com isto a concordância dos resultados numéricos e experimentais melhorou sensivelmente.

CAPÍTULO SETE

DISPERSÃO EM CINDER CONE BUTTE

Neste capítulo aplicamos o modelo numérico para simular um experimento de dispersão em escala real que foi realizado nos EUA pela EPA (*Environmental Protection Agency*) no outono norte americano de 1980.

7.1 - O Experimento de Campo

Cinder Cone Butte (CCB) é uma montanha isolada, aproximadamente axisimétrica com 100 m de altura e uma base grosseiramente circular, com ≈ 900 m de diâmetro. Está localizada no vale do rio Snake, estado de Idaho (noroeste dos EUA). Montanhas altas e abruptas estão 20 km NE e SW de Cinder Cone. O solo é arenoso e rochoso, com algumas gramíneas de no máximo 0.5 m e arbustos esparsos que raramente atingem 2 m (parâmetro de rugosidade $z_0 = 0.1$ m). A figura 7.1 mostra a topografia de CCB. O terreno em torno da base da montanha foi nivelado aproximadamente a 944 m de elevação. A origem do sistema cartesiano coordenado está no ponto médio entre os dois picos da montanha. O eixo x é alinhado com a direção W-E. Informações meteorológicas da região indicaram uma alta frequência ao longo do ano de noites

com consideráveis inversões de temperatura (forte estratificação estável), uma importante razão para a escolha deste sítio. A predominância dos ventos sobre CCB é de NW e SE, direção segundo a qual está alinhado o vale.

Valores de velocidade e direção do vento, temperatura e flutuações de velocidade foram medidos por instrumentos instalados em seis torres, sendo uma de 30 m e quatro de 10 m sobre CCB (indicadas na figura 7.1), e uma torre de 150 m, 2 km ao norte. Também foram utilizadas sondas meteorológicas (*tethersonde* e *minisonde*) para medição de perfis de velocidade e temperatura (até 200 m acima do terreno local) em duas posições - NW e SE - a 1.3 km do centro de CCB (origem de coordenadas). Hexafluoreto de enxofre (SF_6) foi o gás traçador utilizado. Este foi emitido a 35 m de altura (acima do terreno local) e cerca de 500 m a montante do centro da montanha, a NE ou SE, conforme a direção do vento. Amostras do ar foram colhidas durante os experimentos em 80 coletores posicionados sobre a montanha, a 1 m do solo. A concentração do traçador nas amostras foi analisada por cromatografia a gás. Os resultados representam a média da concentração durante uma hora, a duração de cada caso. Os experimentos foram conduzidos durante a noite ou no início da manhã, sob atmosfera estável (classes E e F). Melhor descrição sobre os instrumentos utilizados, o sistema de aquisição e verificação das medições, o programa de garantia da qualidade dos dados, a estrutura de armazenamento dos arquivos de resultados e outros detalhes dos experimentos estão no relatório publicado pela EPA (Truppi e Holzworth, 1984).

7.2 - O Problema Simulado

Escolhemos para a simulação o experimento 206 (05:00-06:00 hora local), realizado em 24-OUT-80. Este caso foi escolhido (dentre 18 reportados) porque é representativo de condições atmosféricas bastante estáveis (classe E) e foi simulado numérica e fisicamente (em canal hidráulico). A direção média do vento a montante (ao longo da hora de estudo do caso) é 127° (\approx SE). A velocidade média do vento na posição de emissão do traçador é 1.1 m/s (desvio padrão de 0.33 m/s). O gradiente vertical (entre 25 m e 130 m) de temperatura potencial no escoamento a montante é de 2.1 K / 100 m (comparar com valores da tabela 3.2). Nos primeiros

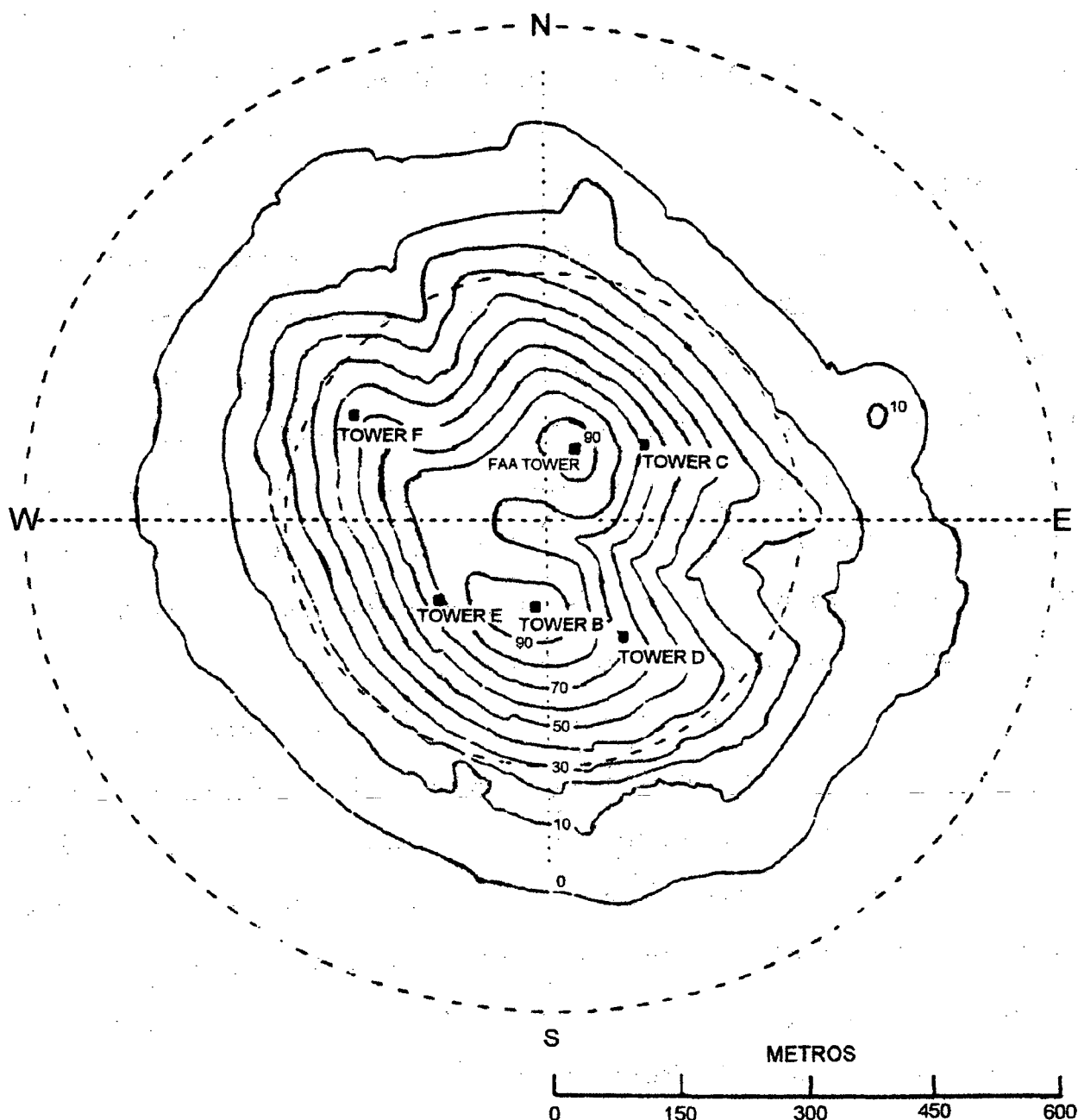


Figura 7.1 - Topografia de Cinder Cone Butte
(intervalo dos contornos = 10 m , base a 944 m de elevação)

25 m acima do solo o gradiente médio é de $7 \text{ K} / 100 \text{ m}$. A posição da fonte é $(x, y, z) = (496.3, -329.8, 35.0)$ e a taxa de emissão é de 0.062 g/s .

As malhas utilizadas foram geradas algebricamente, utilizando-se o programa TOPOGRID (descrito na seção 4.14) para construir a fronteira inferior da malha em função da topografia do terreno e da orientação do vento. A topografia de CCB foi digitalizada (aproximadamente 1400 pontos manualmente !) a partir das curvas de nível reportadas no

relatório da EPA. A resolução empregada na leitura (e interpolação) das curvas foi de 24 m (aproximadamente igual a menor distância entre duas curvas de nível). A figura 7.2 mostra esquematicamente o problema simulado. A malha é alinhada com a direção do vento a montante. No sistema coordenado alinhado com a direção do vento (x' , y' , z), o domínio de cálculo do escoamento na direção longitudinal inicia em $x' = -2000$ m e termina em $x' = 2000$ m, na transversal o domínio estende-se de $y' = -1500$ m a $y' = 1500$ m e a altura é de 1000 m. Para a concentração, o domínio de cálculo na direção do vento inicia 50 m antes da fonte termina 1450 m após esta. Na transversal o domínio estende-se 600 m para cada lado da fonte, e a altura é de 300 m. De fato, esta altura poderia ser ainda menor, pois na simulação numérica a pluma alcançou no máximo a altura de aproximadamente 130 m.

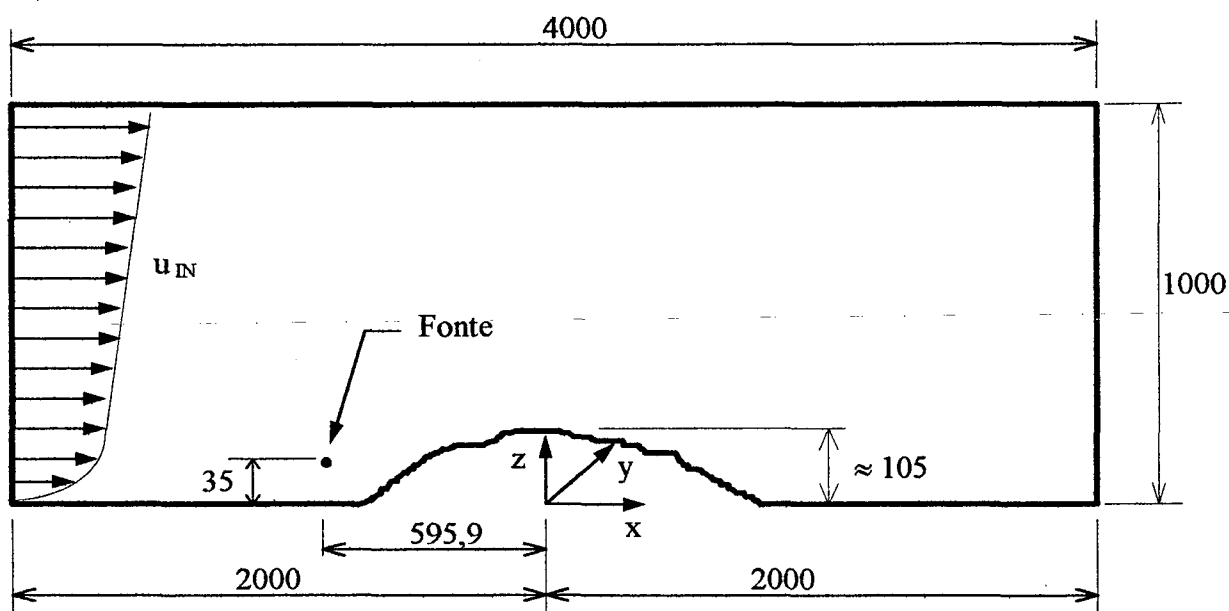


Figura 7.2 - CCB - Vista lateral esquemática do problema simulado (cotas em m)

7.3 - Equações Governantes

As equações de conservação da massa e da quantidade de movimento para o caso em escala real são as mesmas dos casos em túnel de vento estudados no capítulo 6, nominalmente, equações 6.2 e 6.3. A equação da energia é escrita em função da temperatura potencial (equação 6.4 com θ em lugar de T). A equação de dispersão de massa (concentração) possui um

termo fonte, que é igual à taxa de emissão do traçador, no volume que representa a fonte, e zero em todo o resto do domínio.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_j \frac{\partial c}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K_{x_j}^h \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) + S \quad (7.1)$$

Note que nos casos em túnel de vento este termo fonte é nulo e a concentração da fonte é prescrita como condição de contorno nas faces dos volumes adjacentes à fronteira de entrada, que representam a fonte.

Raithby et al (1987) - modelo numérico do escoamento sobre Askervein - e Apsley (1995) - escoamento sobre Cinder Cone - desprezaram o termo de Coriolis na equação do movimento. Da mesma forma que fizemos no estudo do escoamento sobre Askervein (ver seção 5.3.2), desprezamos o efeito de Coriolis também no cálculo do escoamento sobre CCB. Uma verificação do comportamento da direção do vento medida a montante (posição SE) pela sonda meteorológica (*tethersonde*), revela que não há uma tendência de mudança de direção com a altura, pelo menos até 140 m acima do solo, onde a sonda chegou (figura 7.3).

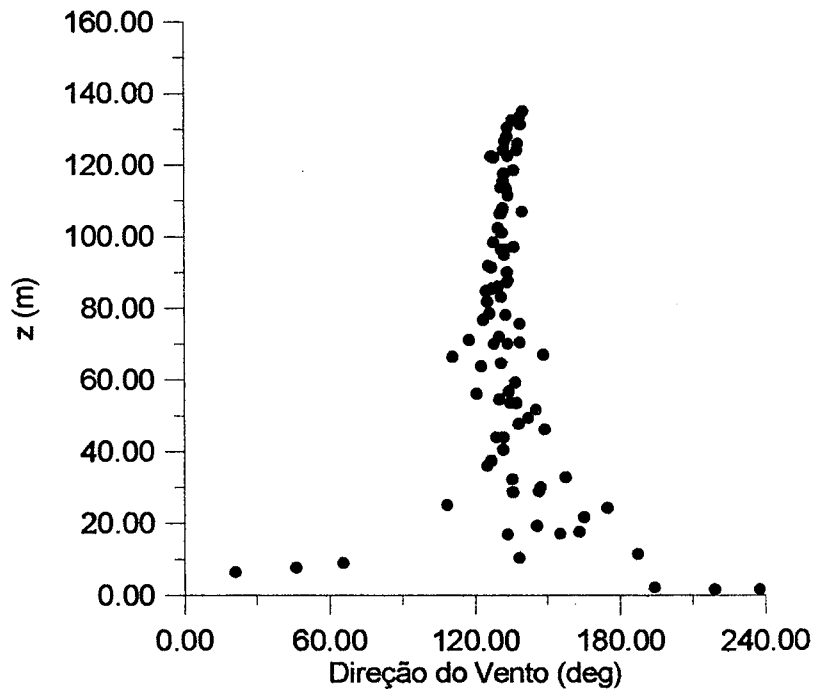


Figura 7.3 - CCB - Direção do vento a montante para o caso 206

Desta forma, conclui-se que o escoamento próximo do solo está aparentemente desacoplado do escoamento acima, onde a mudança de direção com a altura (consequência do efeito de Coriolis) deve acontecer. Portanto, para efeito de previsão da dispersão da pluma, a inclusão do termo de Coriolis na equação do movimento não tem influência sobre os resultados, já que a pluma não se dispersa acima de ≈ 130 m de altura. Ainda mais, com a sua inclusão haveria uma (pequena) mudança gradativa na direção do vento já nos primeiros 150 m acima do solo, o que não foi constatado nas medições experimentais.

O modelo k- ϵ anisotrópico, descrito na seção 2.4.2, é utilizado para determinar as difusividades turbulentas, distintas nas direções horizontal e vertical. As equações de transporte de k e ϵ são, respectivamente, (2.74) e (2.75). As constantes do modelo são aquelas da tabela 2.1 (as mesmas do modelo k- ϵ clássico). Os números de Prandtl e Schmidt turbulentos são iguais a 0.5 .

7.4 - Condições de Contorno

7.4.1 - Fronteira a Montante

Valores de velocidade e temperatura foram medidos pela sonda meteorológica operando até 150 m de altura a SE de CCB, de onde provem o vento no caso estudado. Através dos dados experimentais foram ajustados perfis analíticos para a velocidade e a temperatura. Assim, a velocidade na entrada é dada por

$$u = \begin{cases} u_0 \left(\frac{z}{80} \right)^{0.8} & (z \leq 106 \text{ m}) \\ u_0 \left(\frac{z-95}{80} \right)^{1/7} + 3 & (z > 106 \text{ m}) \end{cases} \quad (7.2)$$

com $u_0 = 6$ m/s. O escoamento na entrada é considerado unidirecional, ou seja, $v = w = 0$. A figura 7.4 mostra os valores medidos e a curva ajustada. Os valores experimentais acima de 150 m foram obtidos através de um balão piloto (*pilot balloon*), lançado a montante da montanha (direção SE) que foi levado pelo vento à medida em que subia. Através de dois teodolitos a

trajetória do balão foi seguida e a velocidade do vento calculada (o procedimento empregado não está descrito no relatório que dispomos). Assim, os valores de velocidade medidos por este balão não correspondem a uma posição (x,y) fixa, pois à medida em que sobe, o balão está se deslocando para jusante da montanha.

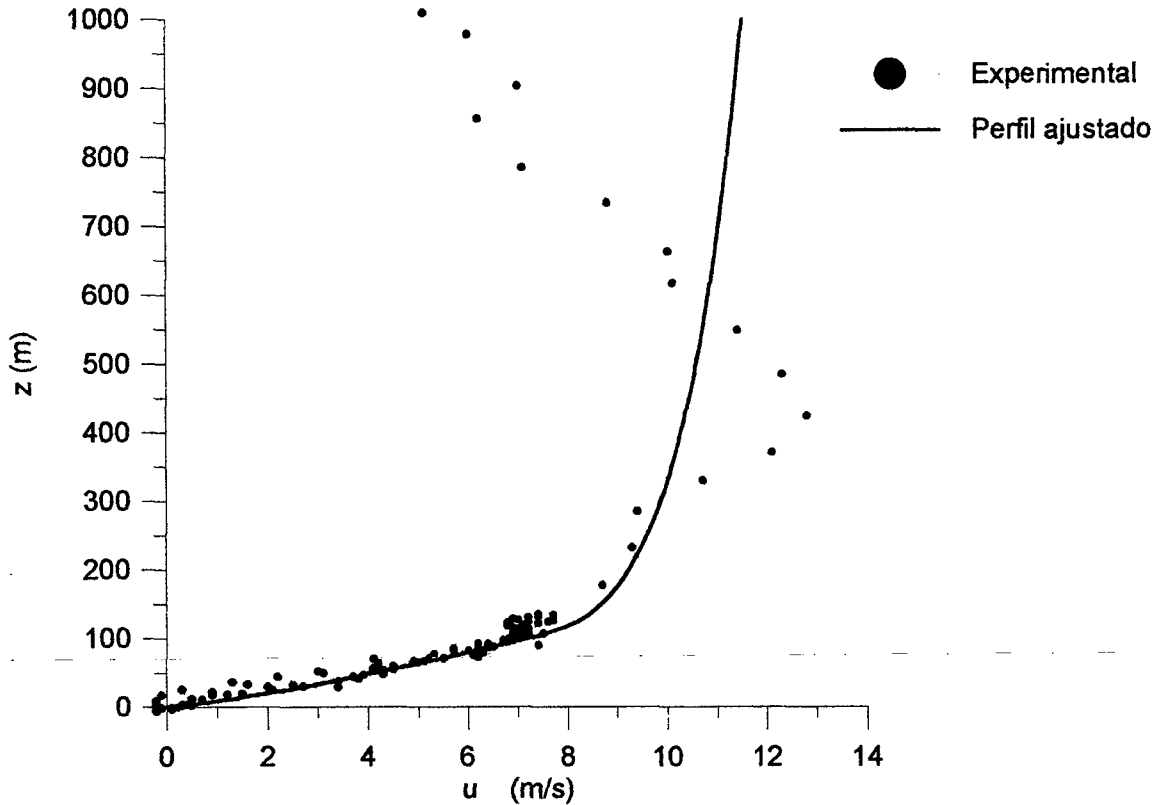


Figura 7.4 - CCB - perfis de velocidade a montante

Para a temperatura a montante, tomamos a expressão dada pela teoria de Monin-Obukhov (equação 3.17). A determinação de θ_0 , T_* e L foi feita mediante um ajuste por mínimos quadrados com os valores experimentais. A expressão resultante para a temperatura potencial a montante é

$$\theta = \theta_0 + \frac{T_*}{k_v} \left(\ln \frac{z}{z_0} + \frac{5z}{L} \right) \quad (7.3)$$

com $\theta_0 = 279$ K, $T_* = 0.053$ K e $L = 33$ m. A figura 7.5 mostra os valores experimentais e o perfil de temperatura prescrito a montante.

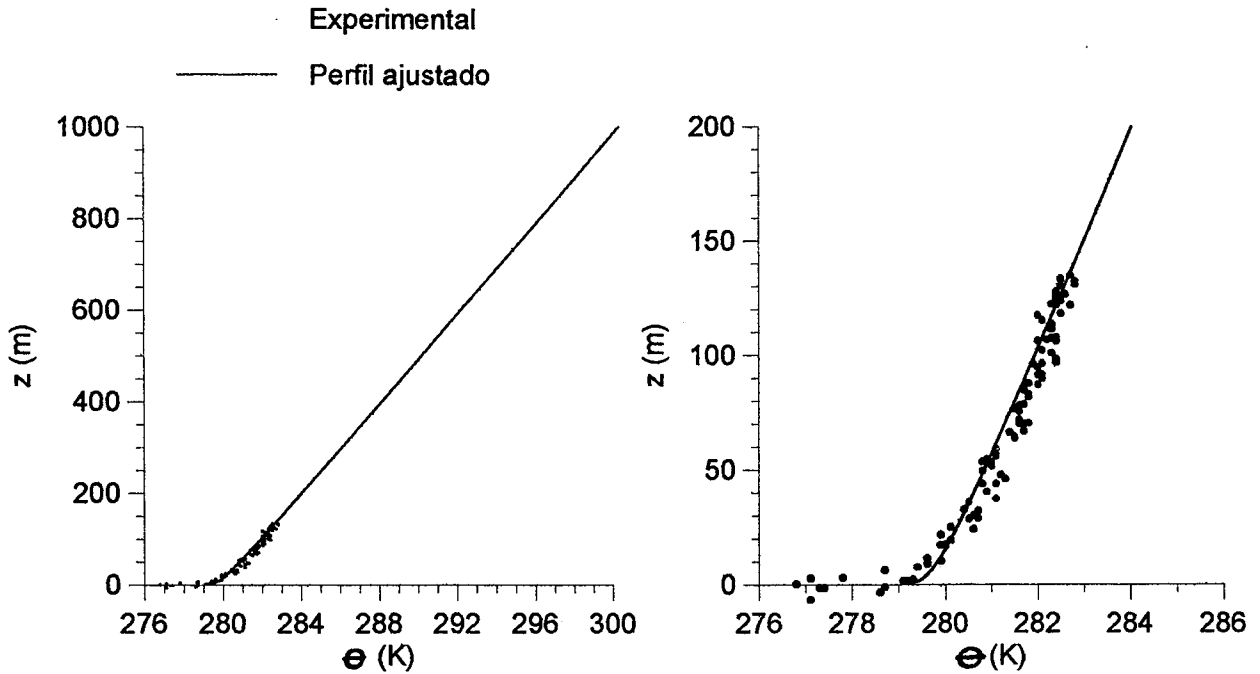


Figura 7.5 - CCB - temperatura potencial a montante
(à direita, detalhe da região próxima do solo)

Como não há medições sobre o nível de turbulência no escoamento não perturbado a montante de CCB, optamos por resolver as contrapartes unidimensionais (na direção z) das equações de transporte para k e ε (considerando os perfis de velocidade e temperatura acima descritos), e prescrever os valores resultantes desta solução como condição de contorno para as variáveis turbulentas na entrada do escoamento tridimensional. A figura 7.6 mostra os perfis de k

e l ($= \frac{C_\mu^{3/4} k^{3/2}}{\varepsilon}$) prescritos dessa forma na entrada do escoamento.

7.4.2 - Fronteira Inferior

O solo é considerado impermeável (velocidade normal nula) e a lei de parede é utilizada para calcular a tensão cizalhante e o fluxo de calor. As expressões da velocidade e da temperatura na camada superficial (seção 3.6) são utilizadas para se derivar expressões para a lei

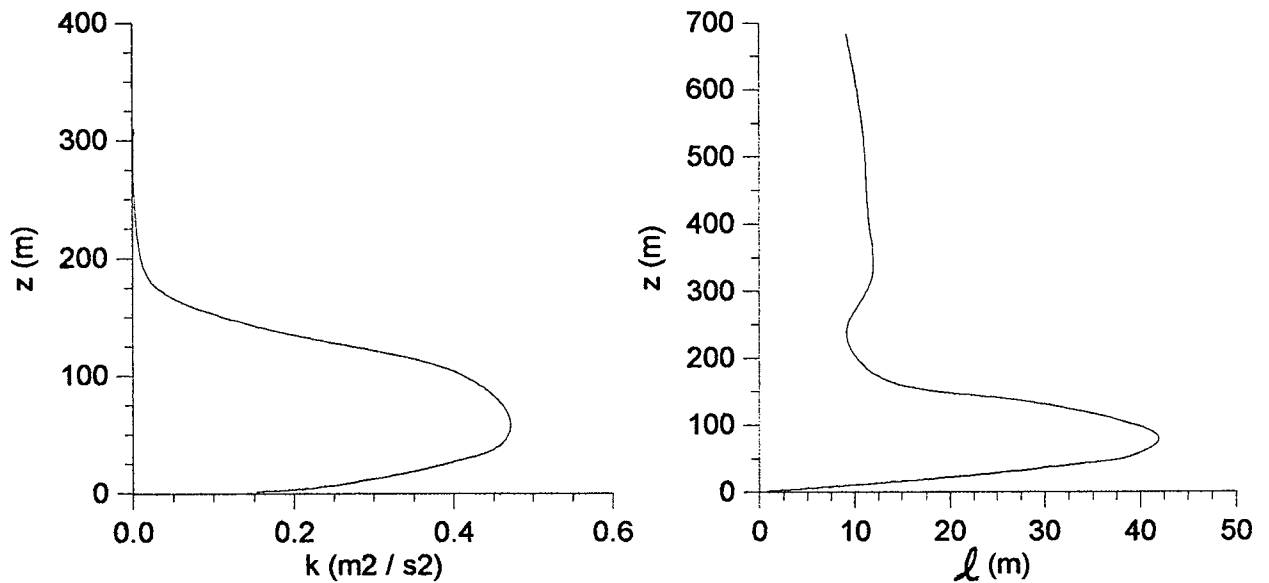


Figura 7.6 - CCB - perfis de energia cinética turbulenta e comprimento de escala a montante

de parede, adequadas para o escoamento atmosférico. A velocidade nos volumes adjacentes ao solo relaciona-se com a tensão cizalhante (através da velocidade de fricção, equação 3.1) por

$$V_p = \frac{u_*}{k_v} \left[\ln \frac{h_p}{z_0} + \Psi_m \left(\frac{h_p}{L} \right) \right] \quad (7.4)$$

A rugosidade relativa é $z_0 = 0.1$ m. A temperatura é prescrita no solo como sendo igual a temperatura (também no solo) a montante $\theta_0 = 279$ K, obtida conforme explicado na seção anterior (7.4.1). A temperatura nos volumes adjacentes ao solo relaciona-se com a temperatura do solo e com o fluxo de calor por

$$\theta_p - \theta_0 = \frac{-H}{k_v \rho C_p u_*} \left(\ln \frac{h_p}{z_0} + \frac{5h_p}{L} \right) \quad (7.5)$$

A expressão acima é a lei da parede para a temperatura, adaptada para escoamento atmosférico. L é calculado por (3.2). A velocidade de fricção (u_*) e o fluxo de calor (H) são acoplados com o comprimento de Monin-Obukhov de uma forma não linear, pelas equações (7.4) e (7.5). Esta não linearidade é resolvida “automaticamente” ao longo do processo iterativo da solução numérica, mediante a atualização dos valores de u_* (através de 3.12) e L a cada iteração.

As condições de contorno para k e ε no solo são obtidas a partir da consideração de equilíbrio local entre produção e dissipação. Da mesma forma como foi feito para o problema em túnel de vento, k e ε tem seu valores prescritos nos volumes adjacentes ao solo pelas equações (6.19) e (6.20). Para a concentração, admitimos que o solo não absorve o traçador, ou seja, o fluxo difusivo de massa é nulo (como feito por Apsley e Castro, 1997). Assim temos

$$\frac{\partial c}{\partial n} = 0 \quad (7.6)$$

7.4.3 - Fronteiras Laterais e Superior

As fronteiras laterais e superior do domínio são consideradas como paredes impermeáveis com deslizamento livre (sem tensão cizalhante) e fluxos difusivos nulos para todas as variáveis. Isto traduz-se nas equações 6.22 e 6.23 do capítulo anterior. Tomamos o cuidado de posicionar essas fronteiras suficientemente afastadas da região do escoamento perturbado pela montanha, verificando na solução o comportamento dos vetores velocidade próximos dessas fronteiras. Assim nos asseguramos de que esta condição de contorno é adequada.

7.4.4 - Fronteira a Jusante

Com o posicionamento da fronteira de saída de massa suficientemente distante da montanha é possível adotar a condição de escoamento localmente parabólico, ou seja, todos os gradientes longitudinais das variáveis são nulos (equação 6.24).

7.5 - Solução Numérica

Nesta seção são comentadas algumas particularidades da solução numérica do problema em CCB. Descrição completa da metodologia numérica está no capítulo 4. O esquema de interpolação utilizado nas equações do movimento, da energia e da concentração é o QUICK (seção 4.4.2), e nas equações de k e ε foi adotado o WUDS (seção 4.4.1). As razões para essas escolhas estão explicadas na seção 4.4.2. Malhas distintas foram utilizadas para a solução do escoamento e da concentração. As figuras 7.7 a 7.10 mostram as malhas utilizadas, cujos números de volumes estão na tabela 7.1. As malhas finas possuem o dobro de volumes em cada direção, em relação às grosseiras. A resolução horizontal da malha fina para o escoamento, na porção sobre a montanha, é de 30.5 m. A menor resolução na direção vertical está nos volumes adjacentes ao solo, a qual é de 1.4 m. Para a concentração, a menor resolução está no volume que representa a fonte, o qual é um cubo de aresta 3 m e 1.5 m, respectivamente, para a malha grosseira e fina.

	Escoamento		Concentração	
	NX x NY x NZ	Total de volumes	NX x NY x NZ	Total de volumes
Grosseira	35x32x18	20160	49x49x27	64827
Fina	70x64x35	156800	98x97x55	522830

Tabela 7.1 - Número de volumes das malhas para CCB

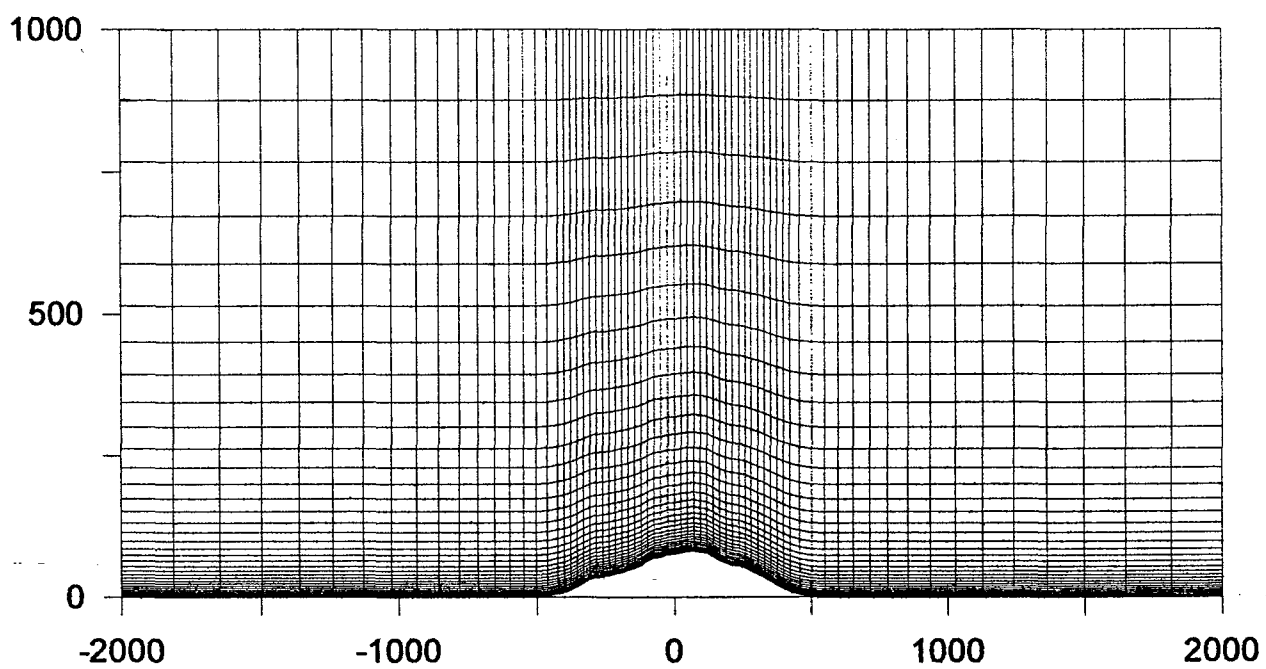


Figura 7.7 - Vista lateral da malha fina para o escoamento sobre CCB - cotas em m

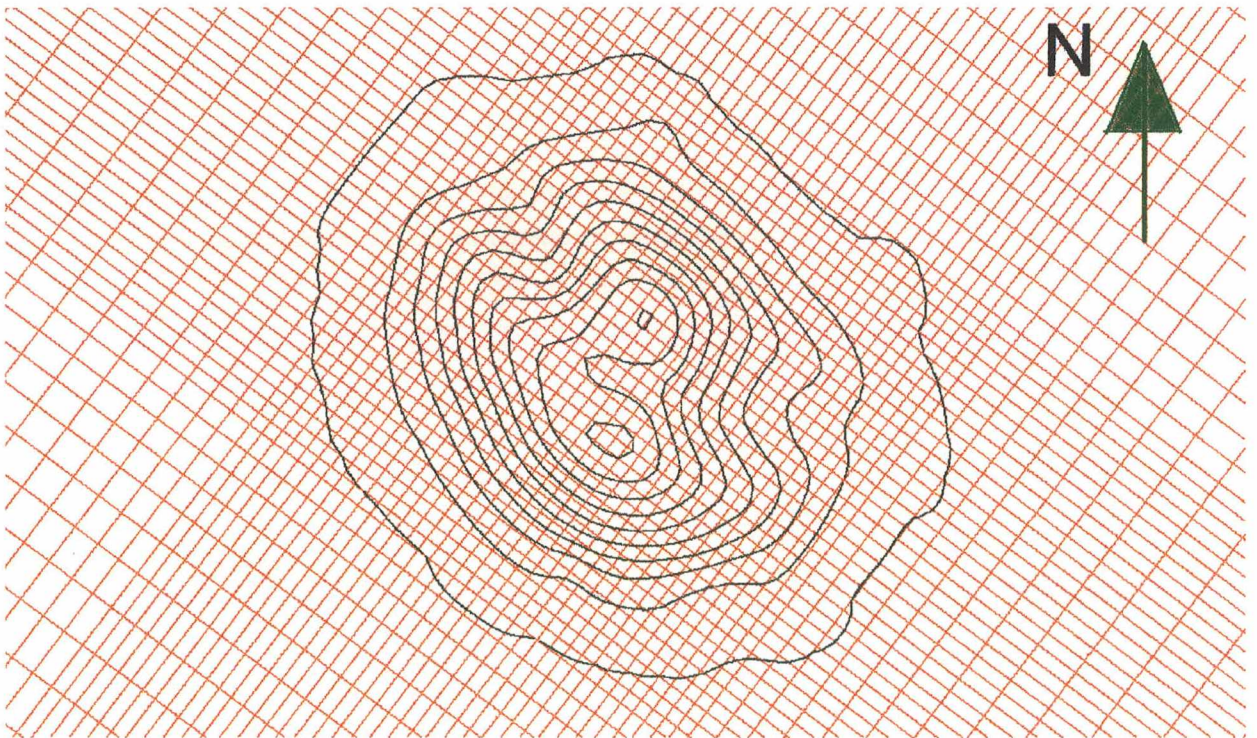
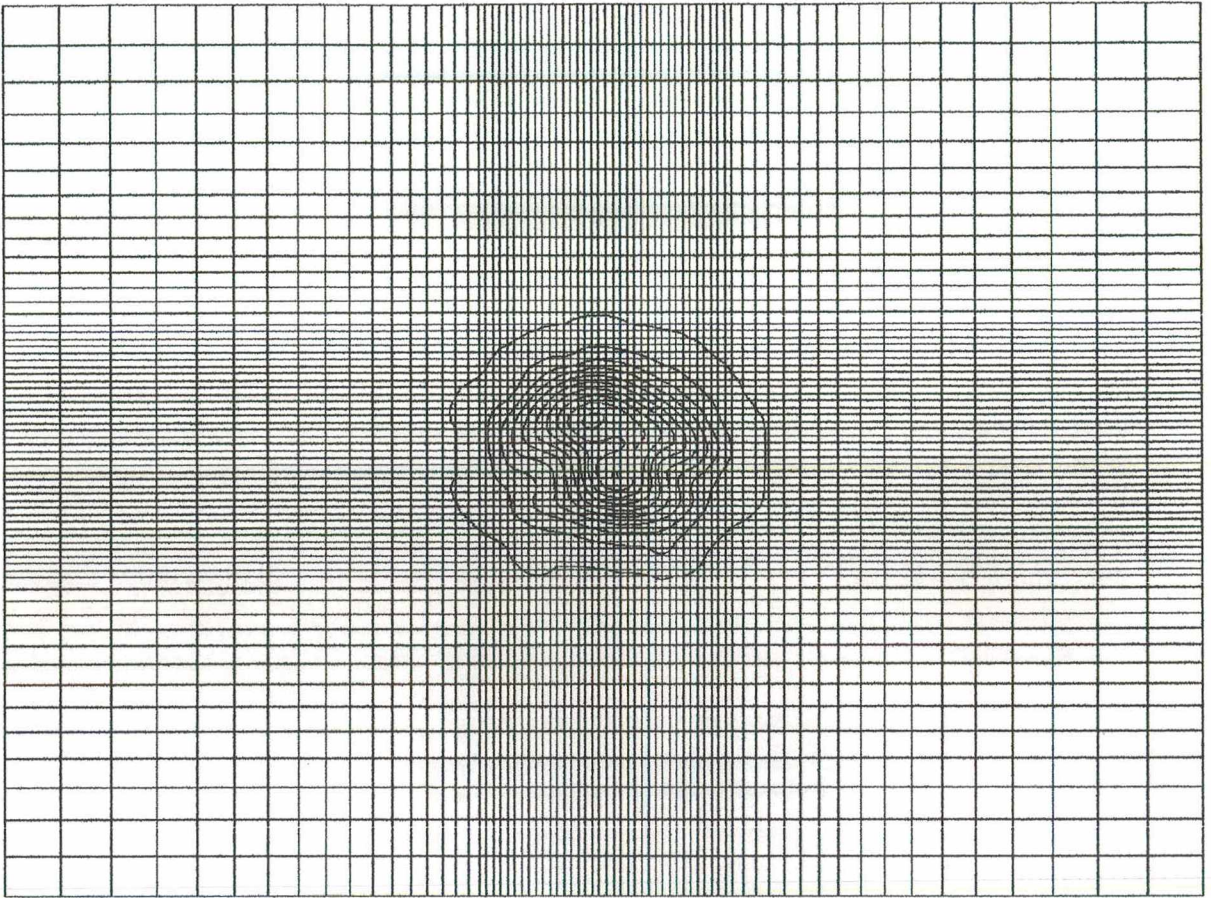


Figura 7.8 - Vista superior da malha fina para o escoamento sobre CCB - abaixo, detalhe da montanha alinhado com o Norte

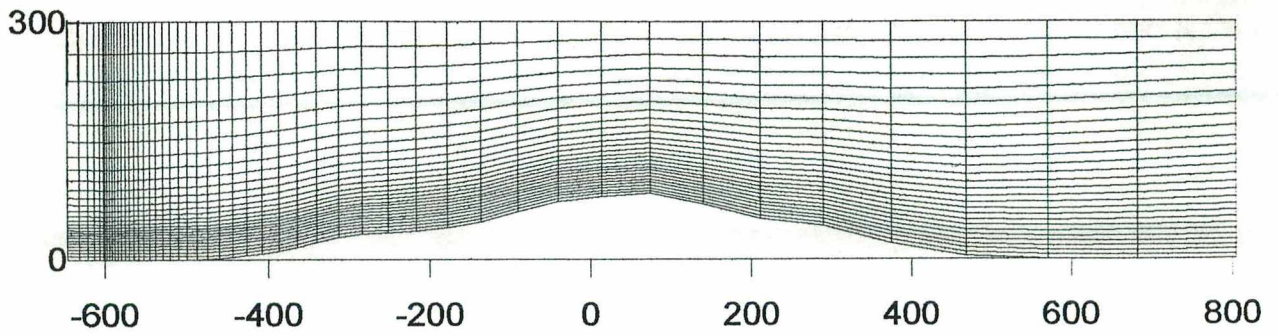


Figura 7.9 - Vista lateral da malha grosseira para a concentração em CCB - cotas em m

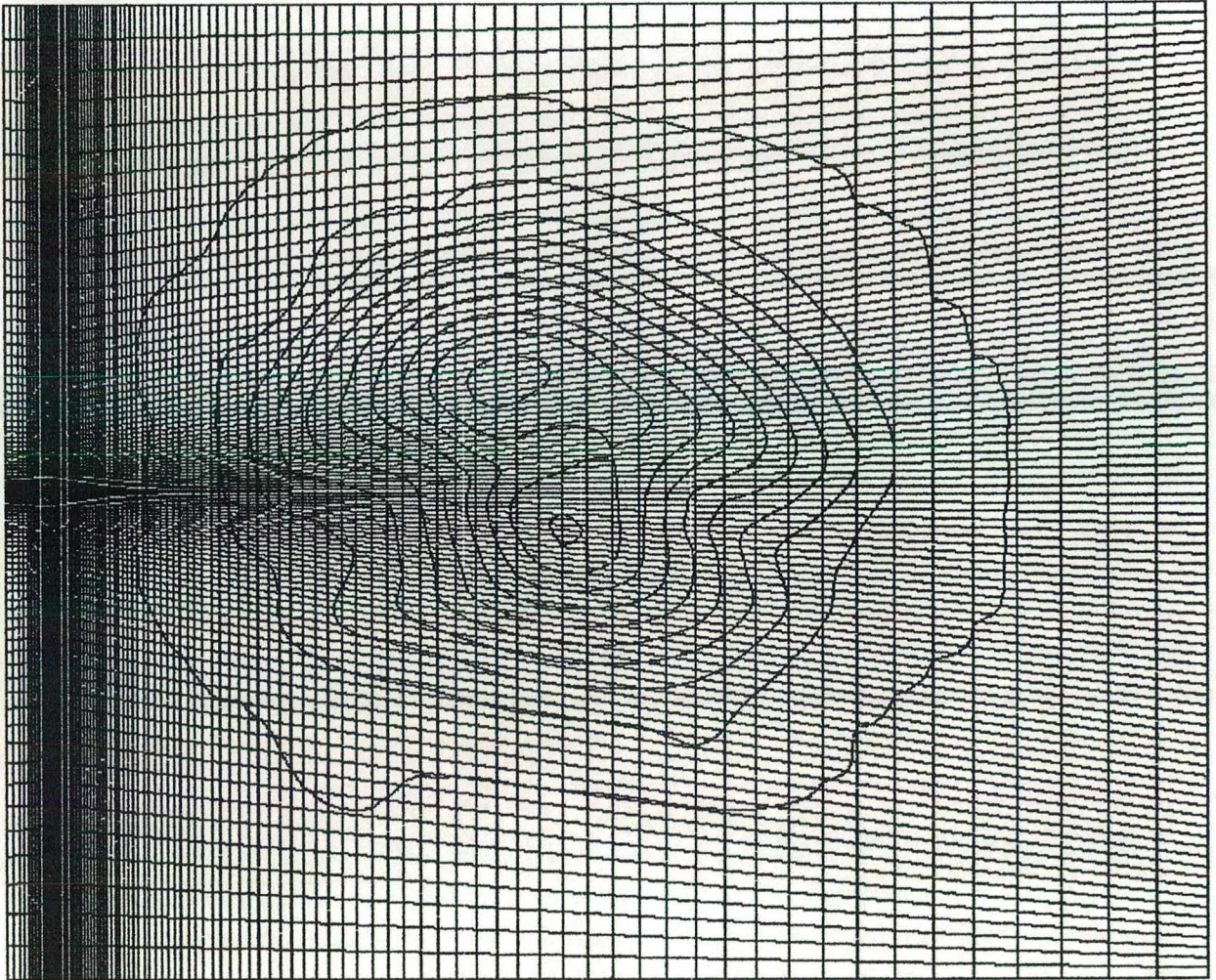


Figura 7.10 - Vista superior da malha fina para a concentração em CCB

Os erros associados à dependência de malha (já que não foi possível proceder um refinamento maior devido à limitação nos recursos computacionais) foram quantificados pelo procedimento descrito na seção 6.5.3 . O índice de convergência de malha (GCI) para a

velocidade (u), as difusividades turbulentas e a concentração em algumas posições ao longo do escoamento estão na figura 7.11. O gráfico (a) refere-se a uma posição a montante de CCB, (b) e (c) referem-se a posições sobre a montanha e (d) a uma posição a jusante ($y = 0$).

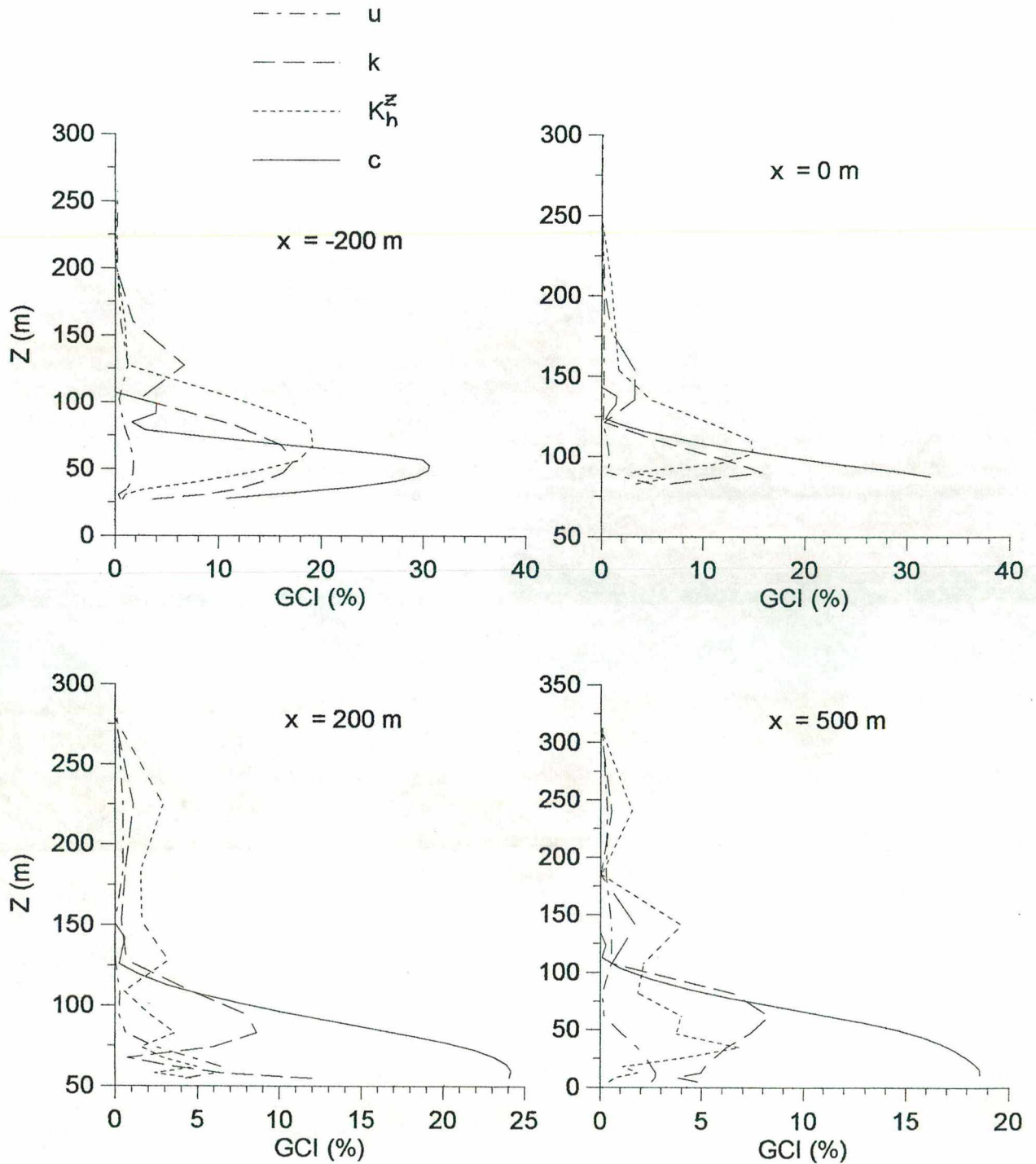


Figura 7.11 - CCB - GCI para velocidade (u), energia cinética turbulenta (k), difusividade turbulenta vertical para escalares (K_h^z) e concentração (c). $DV=127^\circ$

Também foram calculados os GCI's médios globais no domínio (ver seção 6.5.3 para definição), os quais estão na tabela 7.2 . Concentrações inferiores a 40 ppt e superiores a 4000 ppt não foram incluídas no cálculo do GCI global.

Variáveis	u	k	K_h^z	c
GCI	0.80 (1.16)	7.18 (4.63)	17.25 (16.57)	14.25 (25.45)

Tabela 0.1 - GCI médio global (percentual) para o caso CCB - DV=127° (desvio padrão entre parênteses, em pontos percentuais)

7.6 - Resultados do Escoamento

Os resultados do escoamento sobre CCB apresentados nesta seção correspondem ao caso 206 (5:00-6:00), para a direção de vento DV = 127°. Alguns aspectos interessantes do escoamento devem ser notados. Nos níveis mais baixos (próximos do solo) o escoamento apresenta grande divergência lateral, no sentido de contornar a montanha. Isto pode ser constatado na figura 7.12 , onde são mostrados os vetores velocidade num plano horizontal em $z=7$ m. Essa camada onde o escoamento praticamente esco horizontalmente contornando a montanha estende-se até aproximadamente 10 m acima da base desta. Acima, encontramos uma camada intermediária onde há pequeno desvio lateral, acompanhado de deslocamento vertical (ver figura 7.13). Esta camada estende-se até $z \approx 20$ m . Acima deste nível, observamos que o escoamento praticamente não sofre desvio lateral, apenas sobrepassa a montanha realizando um deslocamento vertical, como mostra a figura 7.14 .

A figura 7.15 mostra a componente horizontal dos vetores velocidade a 10 m acima do solo. Uma secção longitudinal (alinhada com a direção do vento a montante) passando pelo pico sul (onde está a torre B) mostrando os vetores velocidade está na figura 7.16.

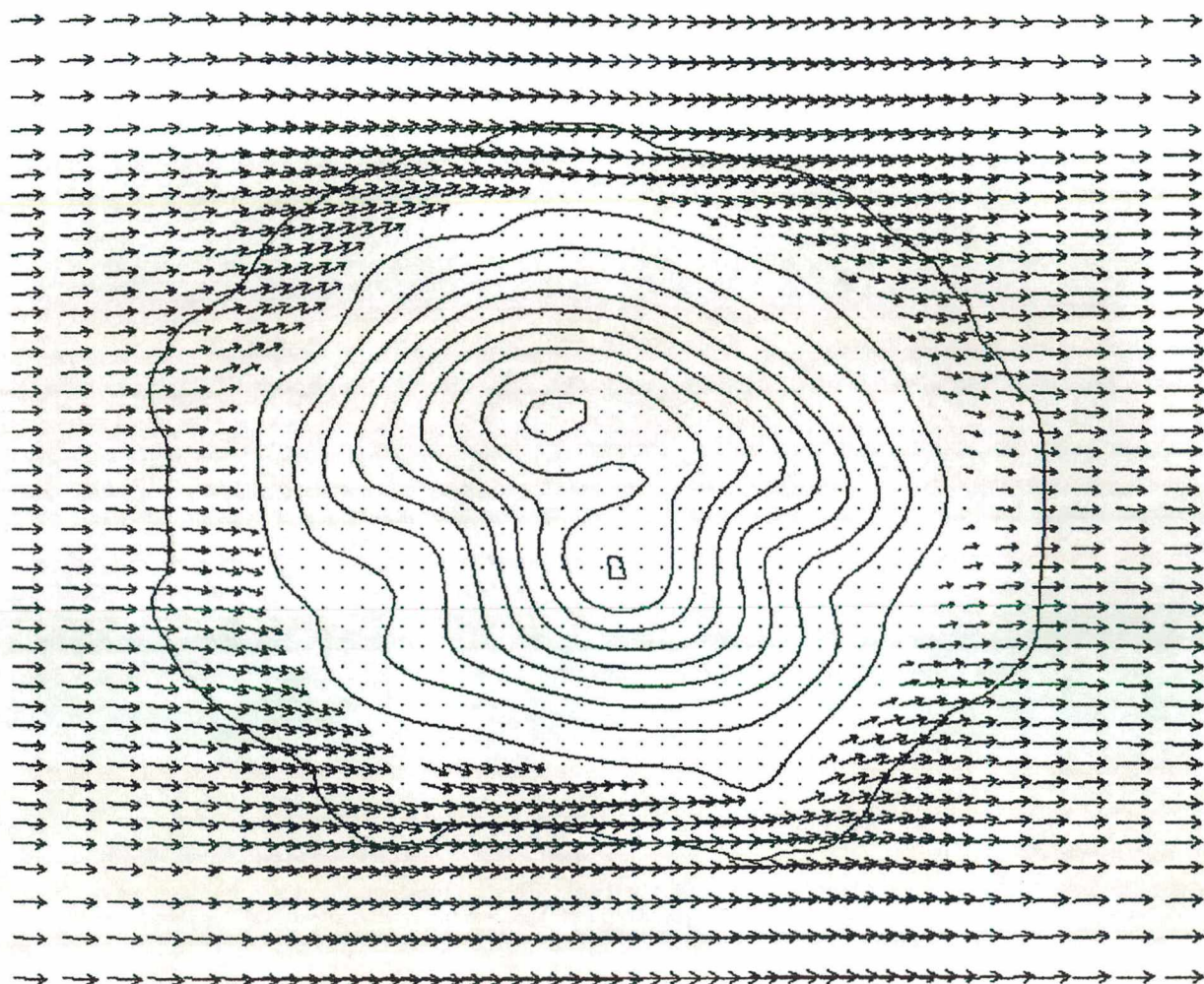


Figura 7.12 - CCB - Componente horizontal dos vetores velocidade em $z = 7$ m

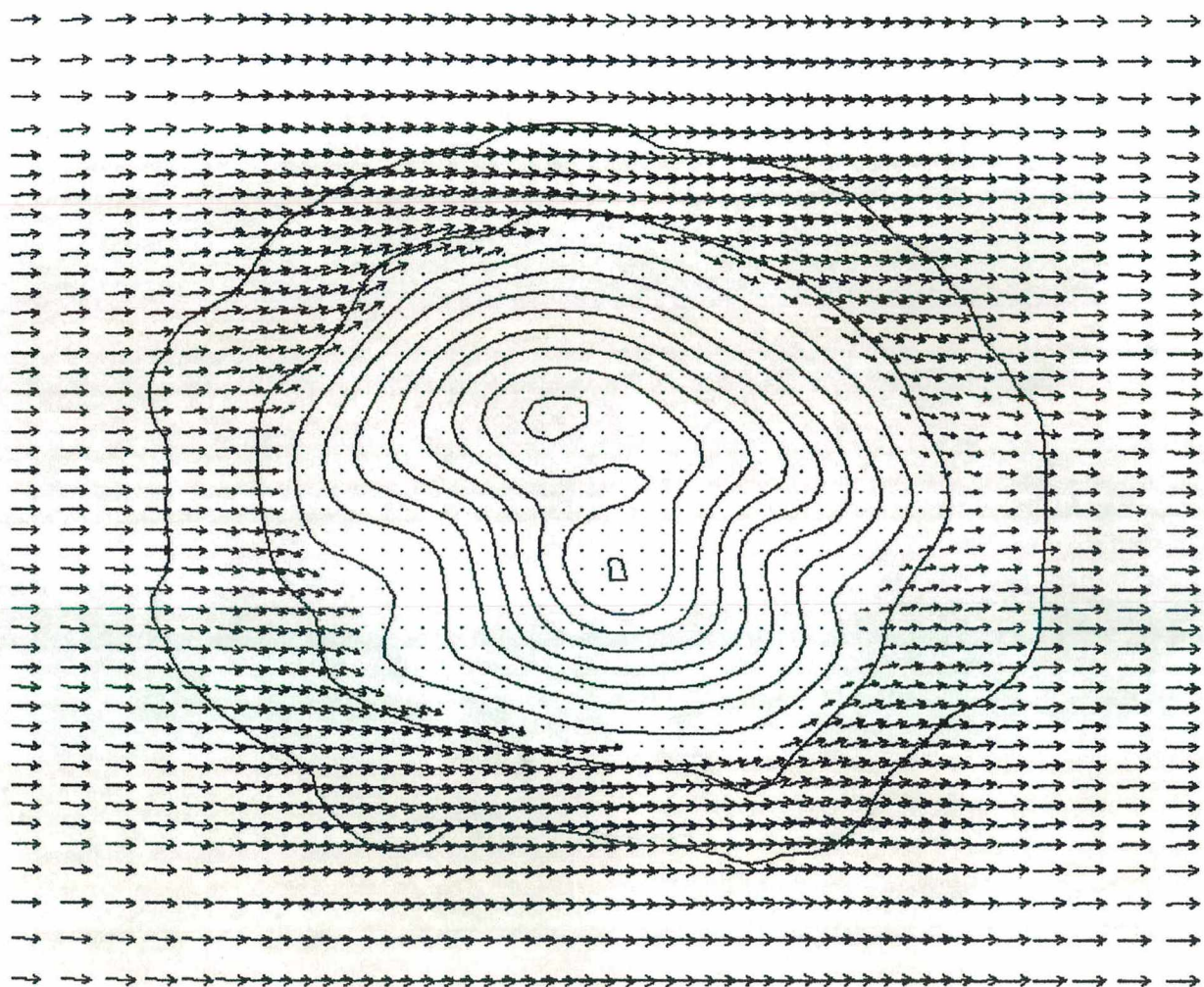


Figura 7.13 - CCB - Componente horizontal dos vetores velocidade em $z = 15$ m

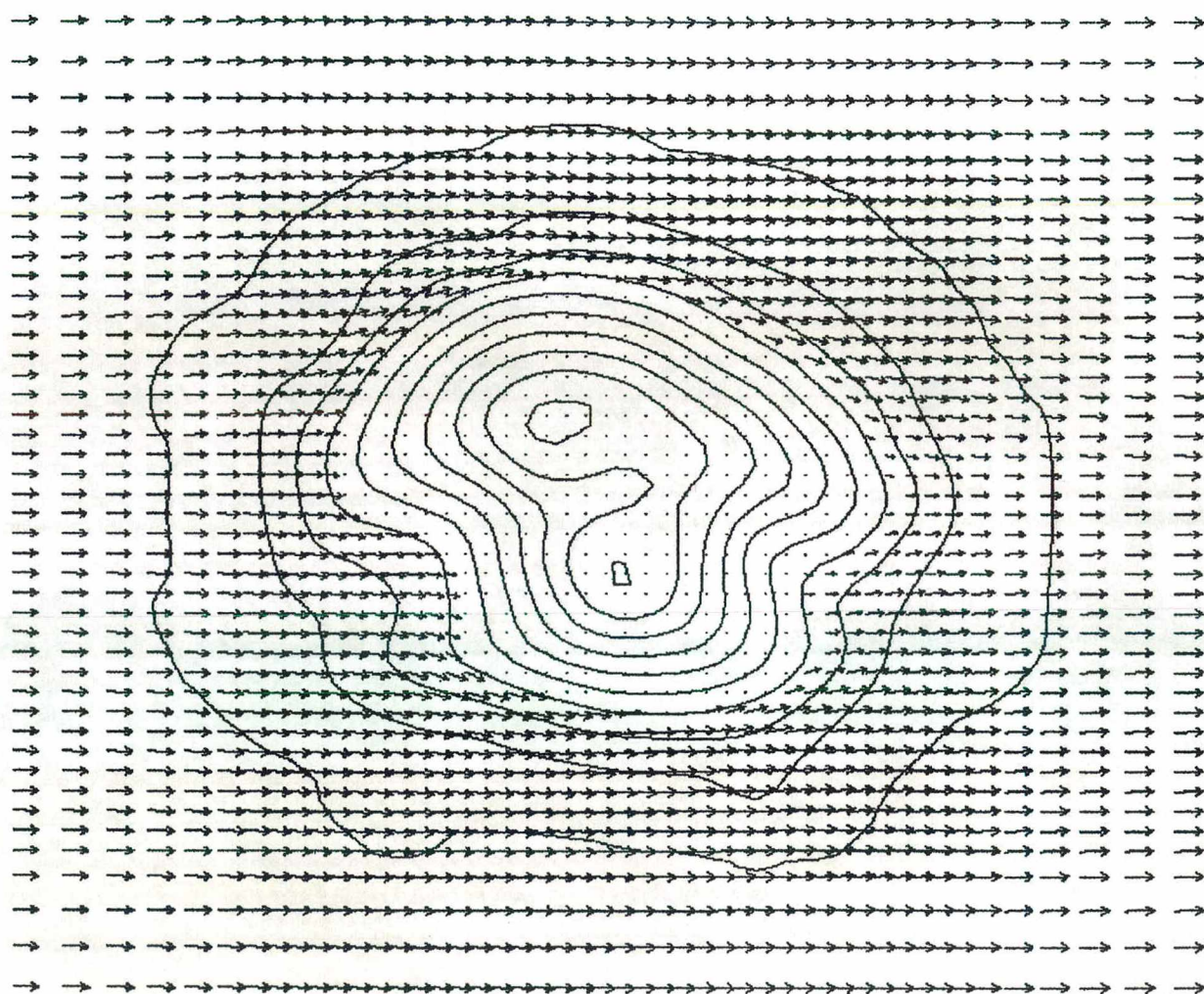


Figura 7.14 - CCB - Componente horizontal dos vetores velocidade em $z = 31$ m

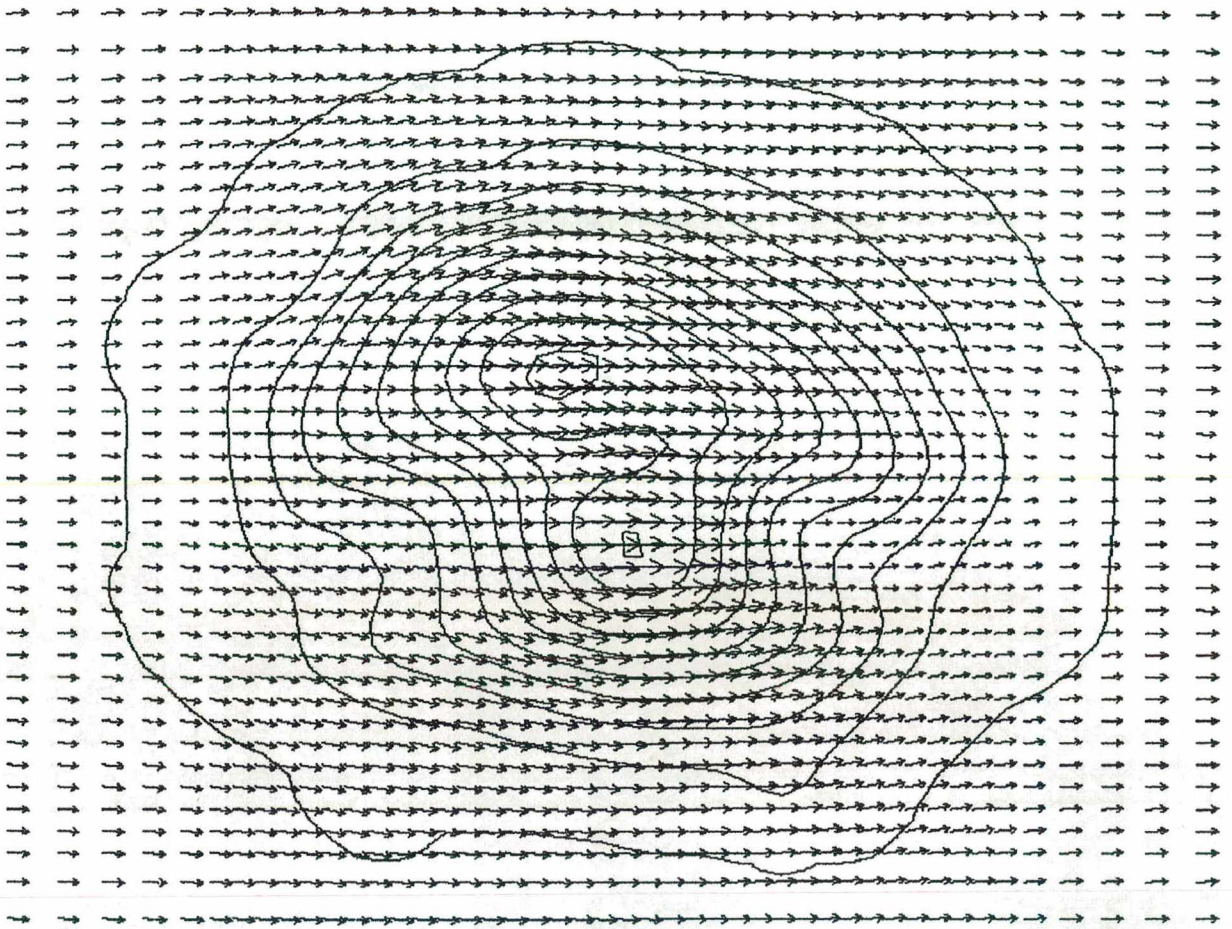


Figura 7.15 - CCB - Componente horizontal dos vetores velocidade a 10 m do solo local

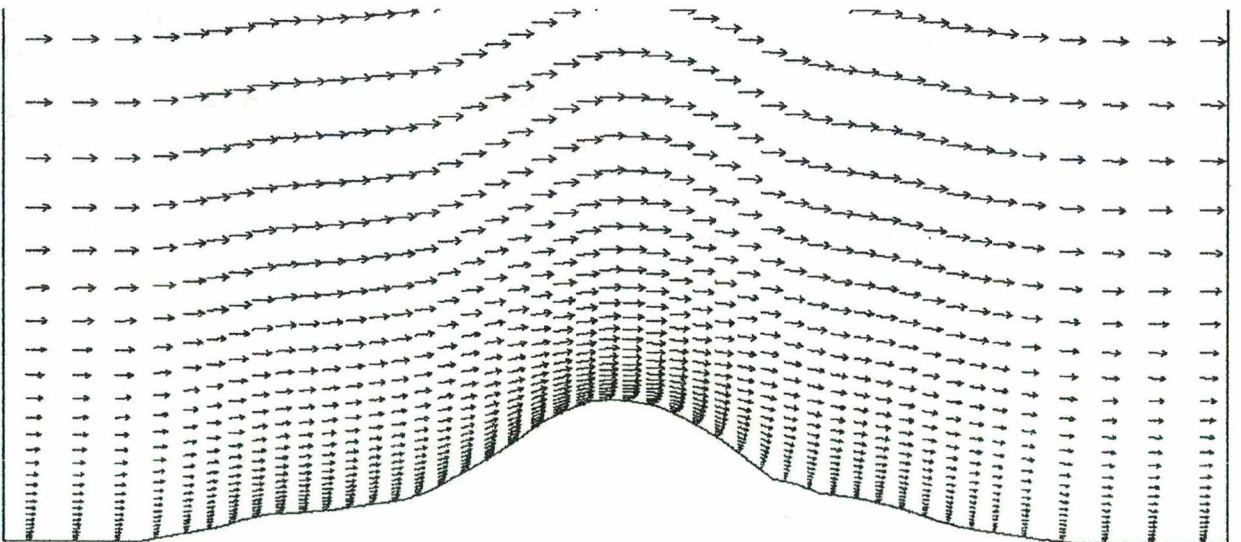


Figura 7.16 - CCB - Componente no plano longitudinal (passando pelo pico sul) dos vetores velocidade

Em escoamentos estavelmente estratificados o fluido precisa adquirir energia potencial para sobrepor um obstáculo, o que pode ser feito de duas maneiras:

- as custas de sua energia cinética,
- por pressão e interação viscosa com elementos de fluido vizinhos.

Snyder et al (1985) assumiu que a segunda fonte de energia é negligível e propôs o conceito da linha de corrente divisória (*dividing streamline*). Segundo este conceito, em condições suficientemente estáveis, existe uma altura no escoamento a montante (h_c), abaixo da qual o fluido não tem energia suficiente para atingir o topo da montanha e precisa circundá-la, seguindo uma trajetória aproximadamente horizontal. Este conceito é análogo ao caso de uma bola rolando montanha acima, ganhando altura as custas de sua energia cinética. A altura da linha de corrente divisória calculada segundo este conceito é dependente da altura da montanha, mas não da sua forma. Para chegar à expressão da altura da linha de corrente divisória, Snyder partiu do teorema de Bernoulli para o escoamento incompressível e não viscoso ao longo de uma linha de corrente.

$$\frac{p}{\rho_\infty} + \frac{V^2}{2} + gz = \frac{p_\infty(z_\infty)}{\rho_\infty} + \frac{V_\infty^2(z_\infty)}{2} + gz_\infty \quad (7.8)$$

onde o subscrito ‘ ∞ ’ refere-se a uma posição distante, a montante da montanha (escoamento não perturbado). Estagnação do escoamento ($V=0$) deve ocorrer em algum ponto na face a montante da montanha se existir uma altura positiva h_c , menor que a altura da montanha h_m , tal que

$$\frac{V_\infty^2(h_c)}{2} = \frac{p_*}{\rho_\infty} + \int_{h_c}^{h_m} (h_m - z') N^2(z') dz' \quad (7.9)$$

onde

$$p_* = p - p_\infty(z) \quad (7.10)$$

é o desvio da pressão em relação à pressão ambiente (∞) à mesma altura, e

$$N = \left(-\frac{g}{\rho_\infty} \frac{\partial \rho_\infty}{\partial z} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (7.11)$$

é a frequência de Brunt-Vaisalla. Em atmosfera estável, uma parcela de ar sutilmente deslocada da sua posição de equilíbrio, na vertical, oscila com esta frequência natural N . Detalhes sobre a obtenção de (7.9) a partir de (7.8) são dados por Snyder et al (1985). Se V_∞ e N são uniformes (constantes) no escoamento não perturbado, (7.9) resulta em

$$\frac{V_\infty^2}{2} = \frac{p_*}{\rho_\infty} + \frac{N^2}{2}(h_m - h_c)^2 \quad (7.12)$$

Se $p_* = 0$ (como assumido por Snyder), isto é, a pressão é igual à pressão ambiente (∞) na mesma altura, a partir de (7.12) temos

$$h_c = h_m(1 - Fr) \quad (7.13)$$

onde $Fr = \frac{V_\infty}{Nh_m}$ é o número de Froude da montanha. Assim, a existência de uma camada do escoamento próxima do solo que não consegue sobrepor a montanha e tem de contorná-la horizontalmente, deve ocorrer para um número de Froude menor que o valor crítico igual à unidade. O conceito da linha de corrente divisória tem sido confirmado em laboratório (Snyder et al, 1985) e está incorporado no modelo (analítico) CTDMPLUS da EPA norte-americana (Perry, 1992).

A partir dos perfis de velocidade e temperatura a montante, para o caso em estudo chega-se a $h_c=32$ m . A verificação dos vetores no escoamento calculado numericamente (ver figura 7.12) revela que a camada próxima do solo que apresenta grande divergência lateral, contornando horizontalmente a montanha, é de apenas uns 10 m , como discutido no início desta seção. De fato não esperávamos confirmar pelo modelo numérico o valor teórico de h_c a partir do conceito de Snyder, visto que este contém várias simplificações, acima expostas.

As figuras 7.17, 7.18 e 7.19 apresentam isolinhas para temperatura potencial e difusividade turbulenta horizontal e vertical (para momento) numa secção longitudinal alinhada com a direção do vento (a montante), passando pelo pico sul de CCB. Note na figura 7.17 que a estratificação do escoamento foi mantida ao longo da passagem pela montanha.

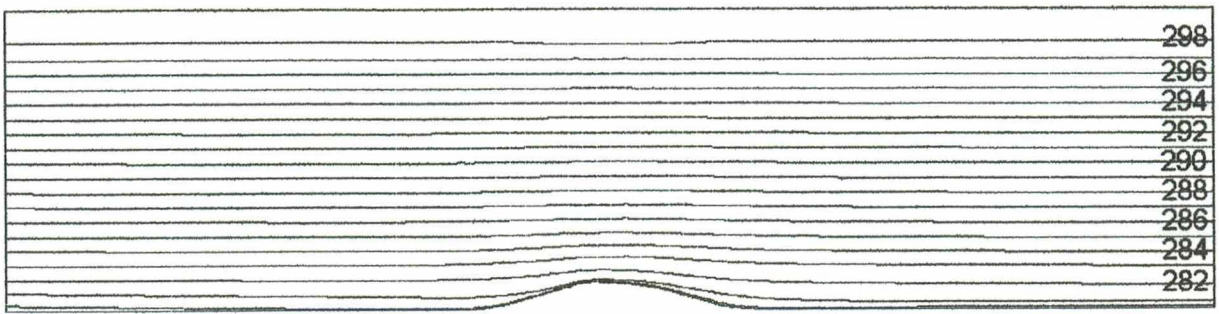


Figura 7.17 - CCB - isolinhas de temperatura potencial numa seção longitudinal passando pelo pico sul (valores em K)

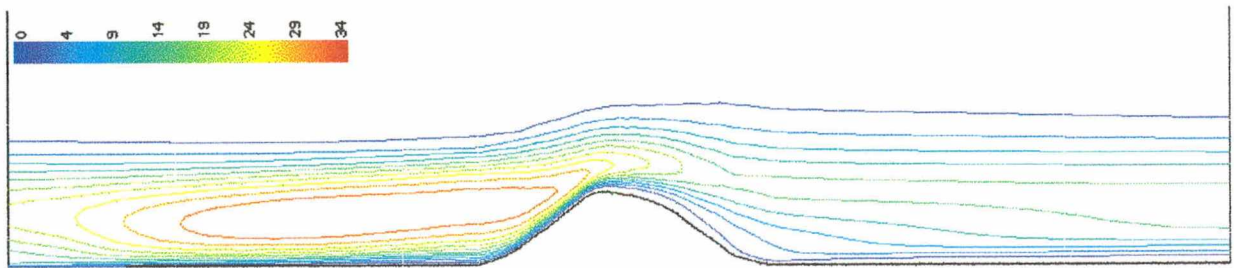


Figura 7.18 - CCB - isolinhas de difusividade turbulenta horizontal (K_x^m), numa seção longitudinal passando pelo pico sul (valores em m^2/s)

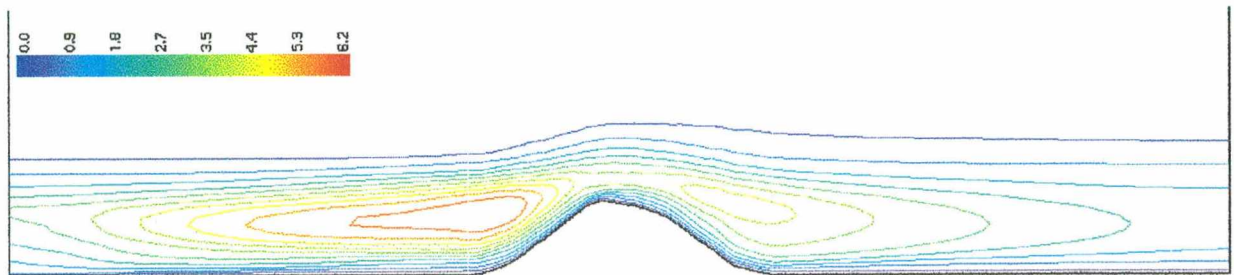


Figura 7.19 - CCB - isolinhas de difusividade turbulenta vertical (K_z^m), numa seção longitudinal passando pelo pico sul (valores em m^2/s)

Procedemos um teste para verificar a sensibilidade dos resultados com relação ao nível de turbulência a montante (condição de contorno para k e ϵ na entrada). Comparamos os resultados obtidos com os valores de k e ϵ da fronteira a montante prescritos conforme seção 7.4.1, contra os obtidos com k e ϵ na entrada dados por (Duynderke, 1988)

$$k = k_0 \left(1 - \frac{z}{h}\right)^2 \quad (7.14)$$

$$\varepsilon = \frac{u_*^3}{k_v} \left(\frac{1}{z} + \frac{4}{L}\right) \quad (7.15)$$

com $k_0 = 0.1 \text{ m}^2/\text{s}^2$ (média das medições na torre A, a 2 e 10m do solo), $h = 1000\text{m}$ (altura do domínio), $u_* = 0.17 \text{ m/s}$ (obtido da equação 2.58) e $L = 33\text{m}$. Nas figuras 7.20 a 7.23 estão os perfis da velocidade horizontal, da energia cinética turbulenta e das difusividades turbulentas horizontal e vertical (para escalares) em diversas posições (a montante, na fonte e nas torres A, B, C e D). São comparadas as soluções com k e ε prescritos da solução unidimensional (conforme seção 7.4.1) e pelas expressões analíticas acima (7.14 e 7.15). Poucos valores experimentais de velocidade e intensidade turbulenta são disponíveis. Interessante notar a grande amplitude de variação dos valores medidos em campo, durante o intervalo de uma hora, no qual foi realizado o experimento de dispersão. Na figura 7.20 pode-se notar que a velocidade praticamente não foi afetada pelos diferentes níveis de turbulência a montante. Já nas figuras 7.22 e 7.23 vê-se que as difusividades turbulenta foram bastante afetadas. Veremos na seção 7.7 como essa mudança nos perfis de difusividade turbulenta modificou os perfis de concentração. Note na figura 7.21 que os perfis de k são praticamente idênticos a jusante, afastado da montanha (torre A). Isto ocorre porque nos praticamente 4 km em que o escoamento se desenvolveu, o nível de k prescrito analiticamente na entrada (inferior ao da solução 1D, ver fig. 7.21, posição a montante) cresceu para se igualar àquele da solução do escoamento homogêneo unidimensional. Desta forma, acreditamos que a melhor forma de prescrever condições de contorno para as variáveis turbulentas na entrada é a de usar os valores resultantes da solução do escoamento unidimensional, conforme explicado na seção 7.4.1.

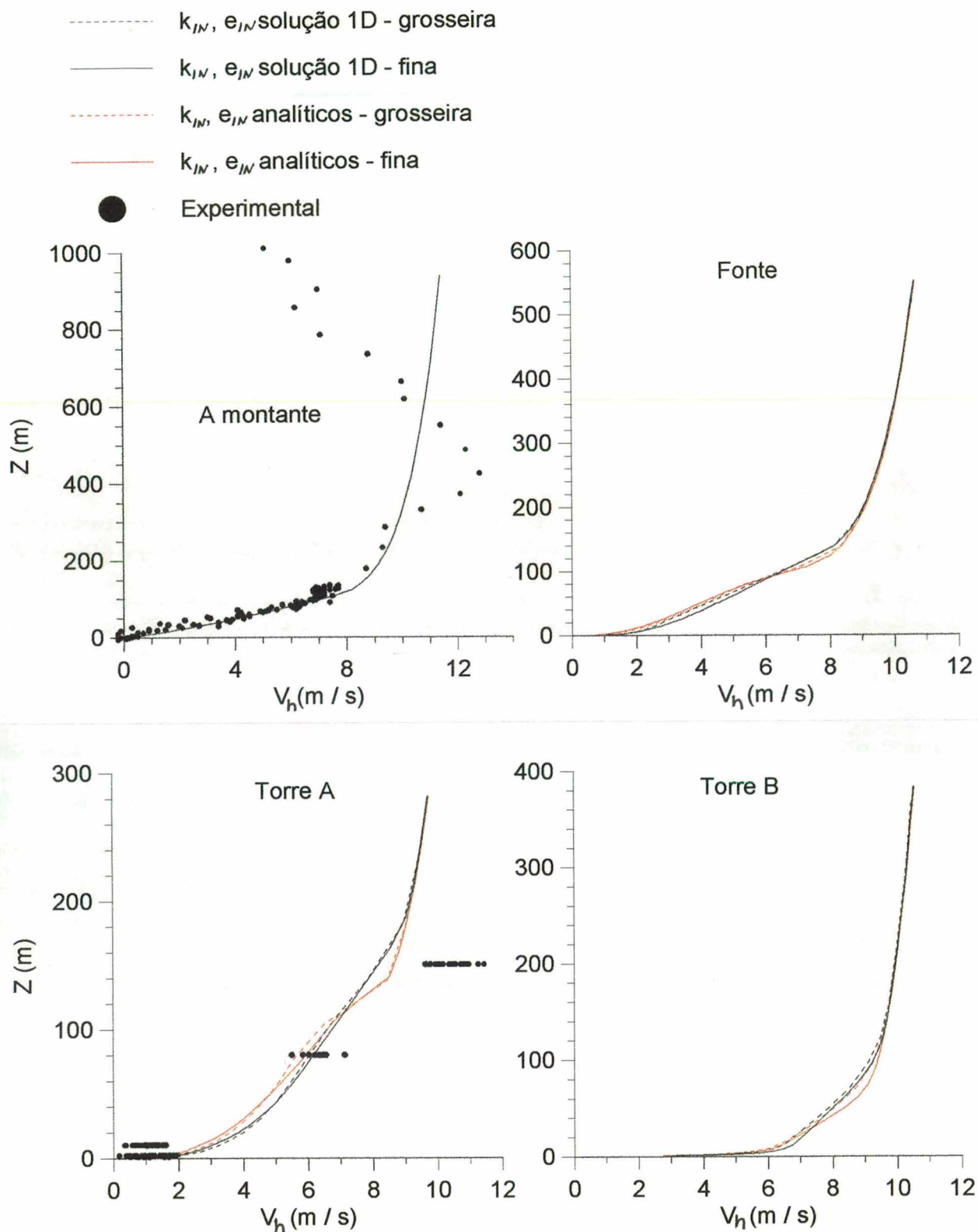


Figura 7.20 - CCB - perfis verticais da velocidade horizontal $V_h = \sqrt{u^2 + v^2}$

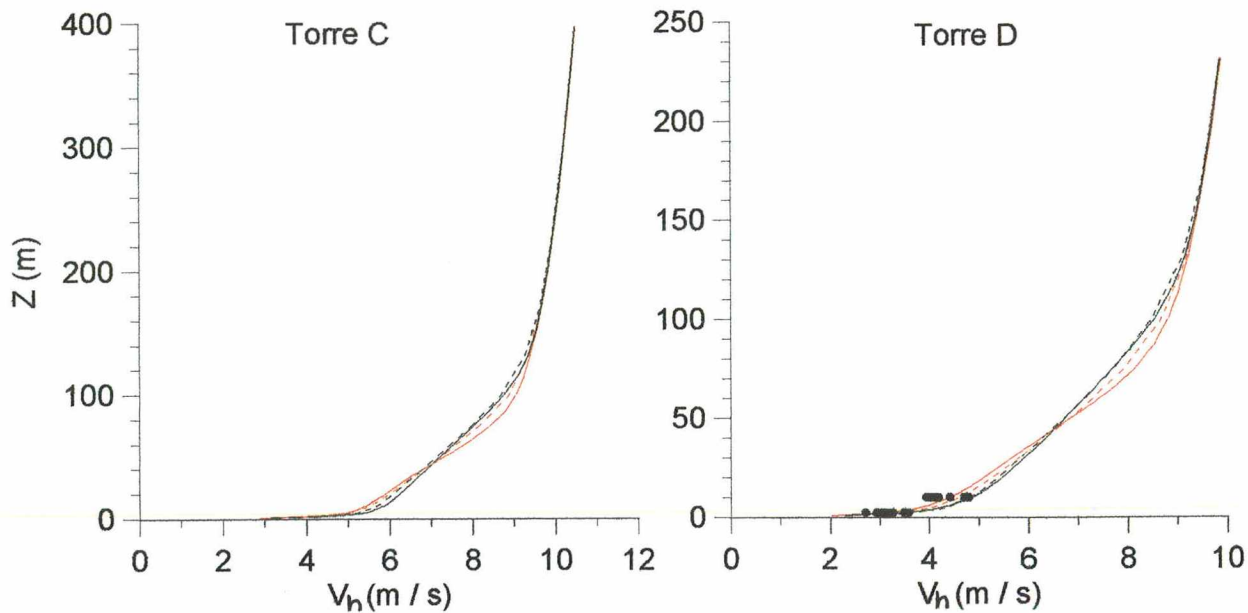


Figura 7.20 - CCB - perfis verticais da velocidade horizontal $V_h = \sqrt{u^2 + v^2}$ (continuação)

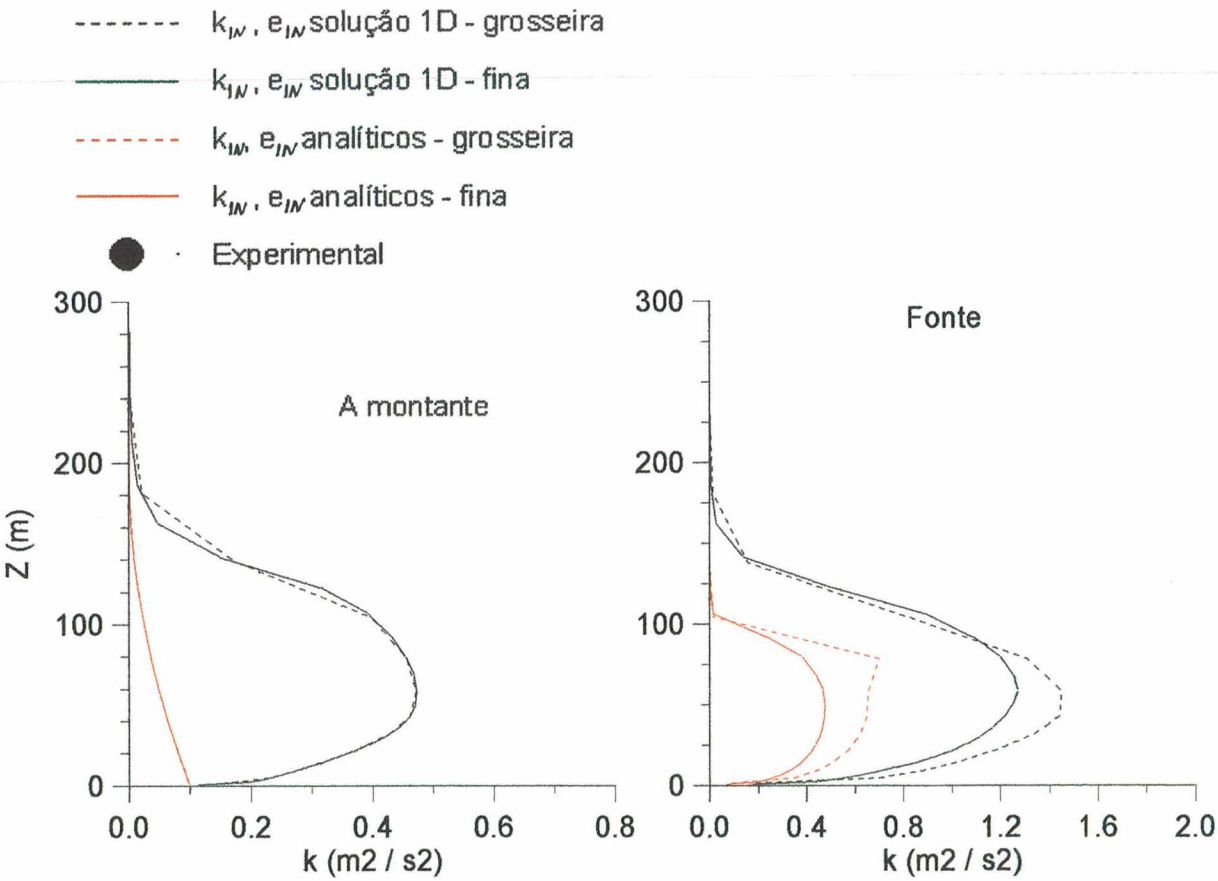


Figura 7.21 - CCB - perfis verticais de energia cinética turbulenta

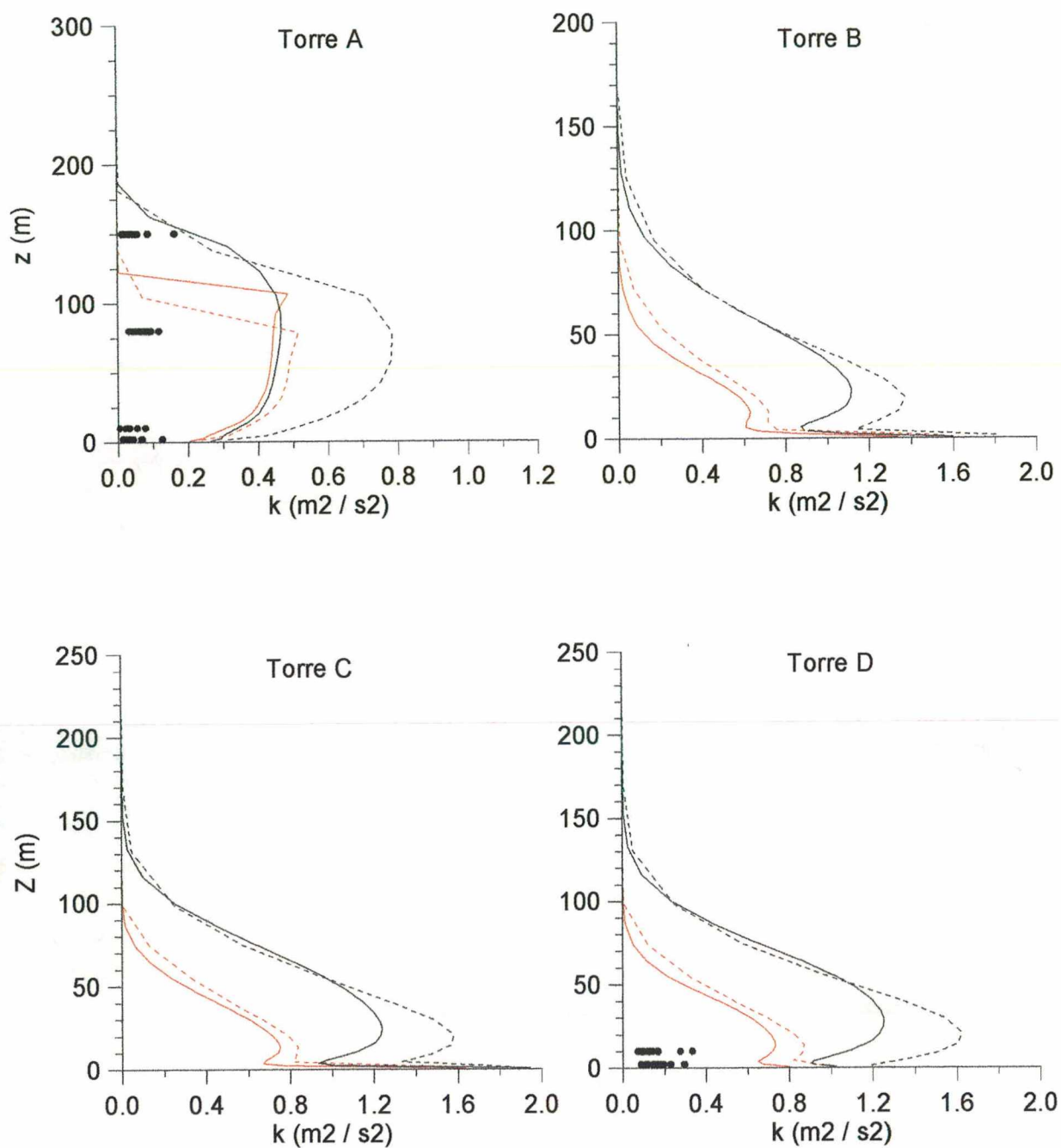


Figura 7.21 - CCB - perfis verticais de energia cinética turbulenta (continuação)

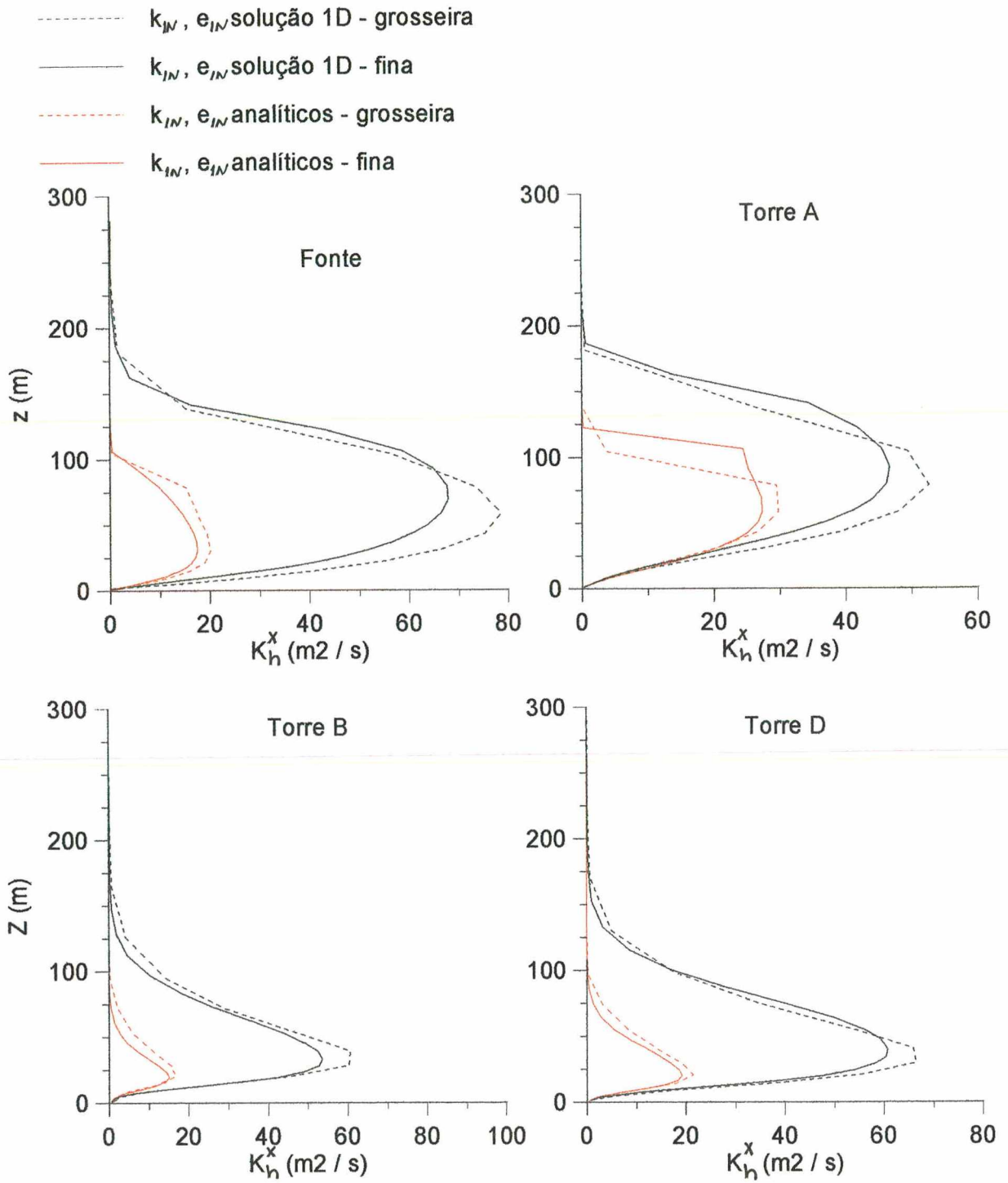


Figura 7.22 - CCB - perfis verticais de difusividade turbulenta horizontal para temperatura e concentração (K_h^x)

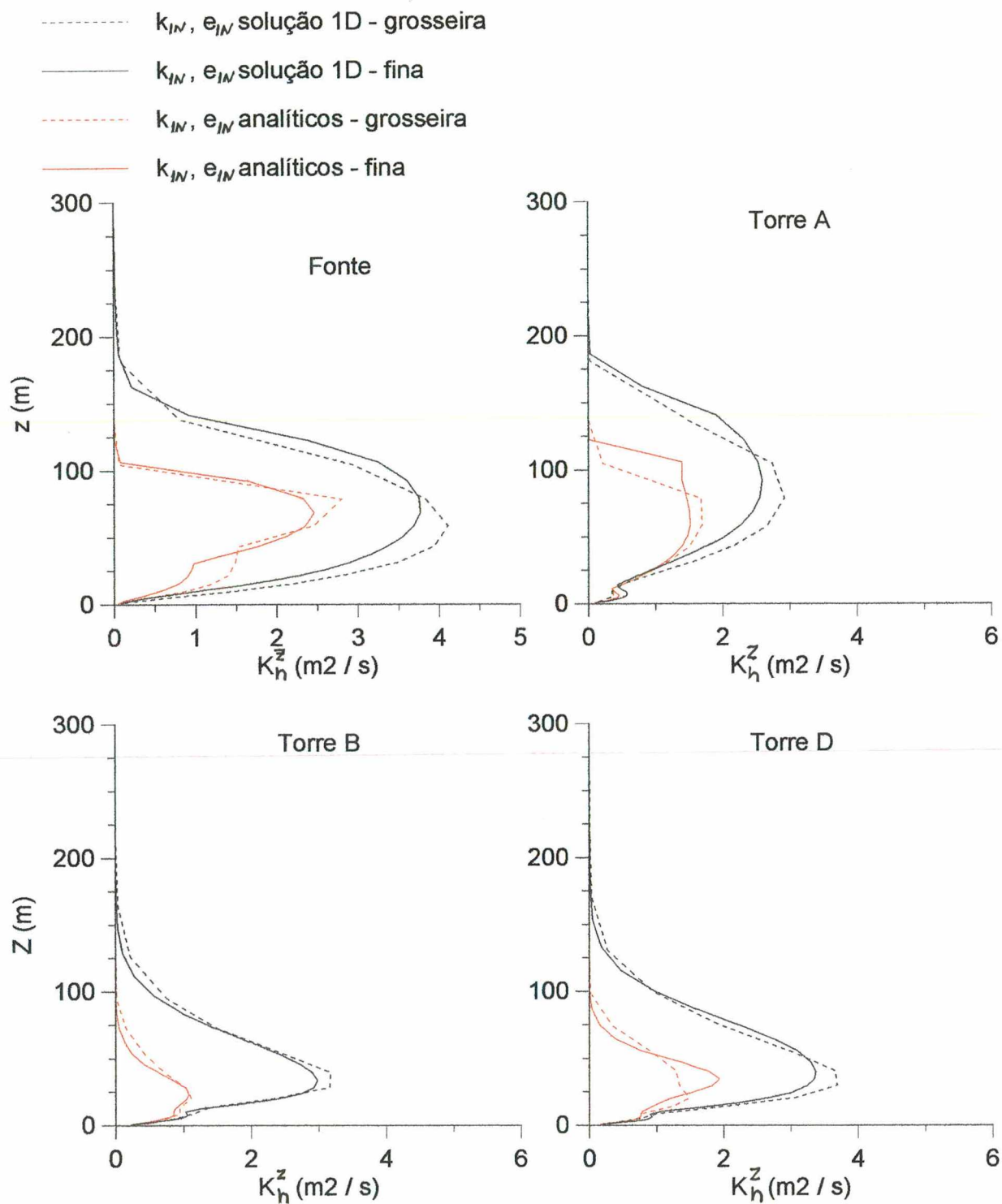


Figura 7.23 - CCB - perfis verticais de difusividade turbulenta vertical para temperatura e concentração (K_h^z)

7.7 - Resultados de Concentração

A dispersão de plumas sob atmosfera estável em terreno plano apresenta a característica de que a pluma percorre um longo trecho até tocar o solo. Assim, as concentrações ao nível do solo nas proximidades da fonte são menores que aquelas resultantes sob atmosfera neutra ou instável. Isto deve-se ao fato de que a difusão na direção vertical é substancialmente reduzida sob condições de estabilidade estável (turbulência inibida por efeitos de empuxo). Já no caso de terreno acidentado, como o de CCB, o impacto da pluma com o solo dá-se muito mais próximo da fonte (comparado com terreno plano) devido à topografia. No caso estudado, a pluma chegou ao solo já na porção anterior da montanha, quer dizer, antes de passar pelo topo. Observa-se também (ver figura 7.24) que a pluma sofreu um desvio lateral, devido à divergência do escoamento que contorna de maneira aproximadamente horizontal a montanha, próximo do solo.

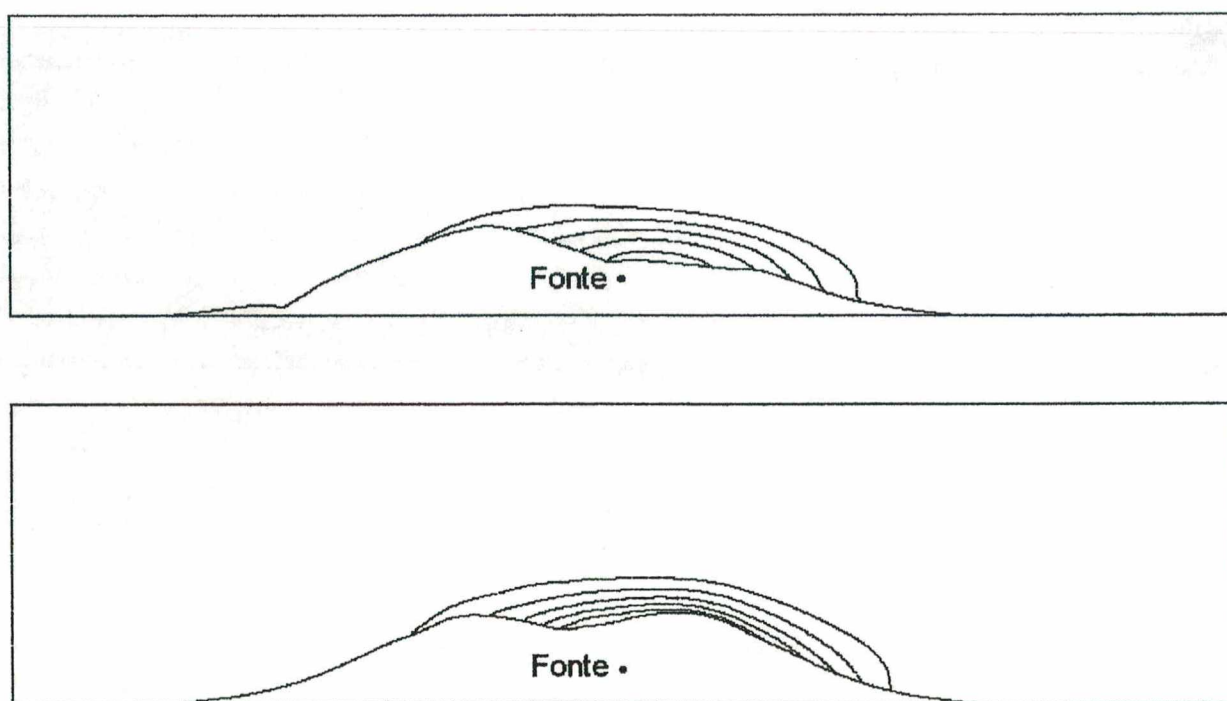


Figura 7.24 - CCB - concentração na secção transversal - na parte anterior da montanha (acima) e sobre os picos (abaixo) - isolinhas de 200 a 1000 ppt, espaçadas de 200 ppt

As isolinhas de concentração ao nível do solo estão na figura 7.25, bem como aquelas obtidas por Apsley (1997), utilizando um k- ϵ modificado (com limitação no comprimento de

escala). Os valores experimentais (obtidos através das amostras coletadas durante uma hora a 1 m do solo) estão superpostos nesta figura. Percebe-se que o caminho da pluma numérica é deslocado para o lado norte de CCB ($y' < 0$, no sistema coordenado alinhado com a direção do vento). Este desvio considerável deve-se ao fato de que a pluma é convectada pelo escoamento que, pelo efeito da estratificação estável e da topografia, é compelido a contornar a montanha. Também nota-se que os valores experimentais de concentração são, em geral, inferiores aos previstos pelo modelo. Há que se considerar que os valores medidos são médios no período de uma hora, tempo de duração do experimento. Neste intervalo, especialmente nos níveis próximos do solo, há uma grande variação da direção do vento (desde 20° até 240°), como pode ser visto na figura 7.3. As mudanças na direção do vento carregam a pluma ora para um lado da montanha ora para outro, fazendo com que haja, na média horária, um espalhamento maior do traçador e conseqüente concentrações menores.

Como fizemos na análise dos resultados para o escoamento, verificamos agora a influência do nível de turbulência prescrito a montante sobre a concentração. A figura 7.26 mostra perfis verticais de concentração em diversas posições ao longo de um plano vertical na direção longitudinal do problema (plano $y' = -50$ m). Comparamos as condições de contorno para k e ε na entrada prescritos conforme a seção 7.4.1 com os perfis analíticos mencionados na seção 7.6 (equações 7.14 e 7.15). Percebemos que nas posições mais próximas da fonte a situação com k e ε analíticos na entrada (menor nível de turbulência) provocou um grande aumento nos perfis de concentração ($x' = -500$ e -200 m). À medida em que se afasta da fonte, as diferenças diminuem. É importante, no entanto, o fato de que mesmo a jusante da montanha ($x' = 800$ m) o nível de concentração é significativamente mais alto, no caso de k e ε analíticos na entrada. Percebe-se aí mais uma grande dificuldade para simular-se casos reais em que geralmente não se dispõem de valores medidos de energia cinética turbulenta e comprimento de mistura para serem prescritos na entrada.

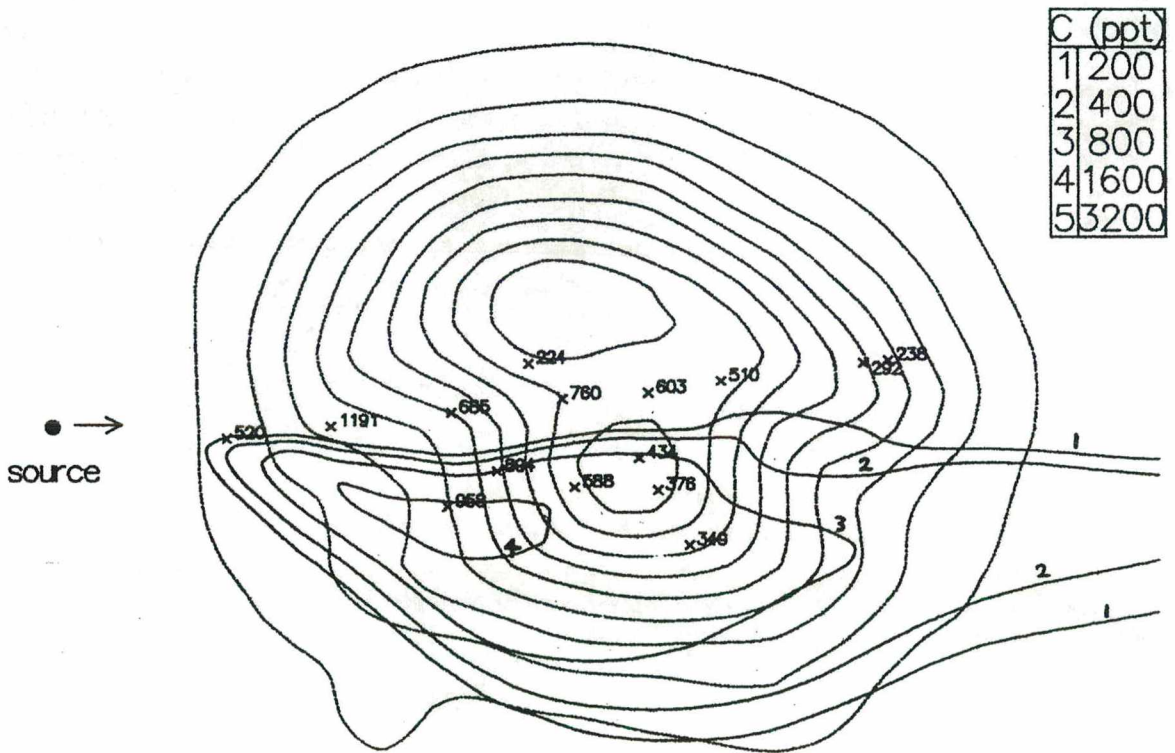
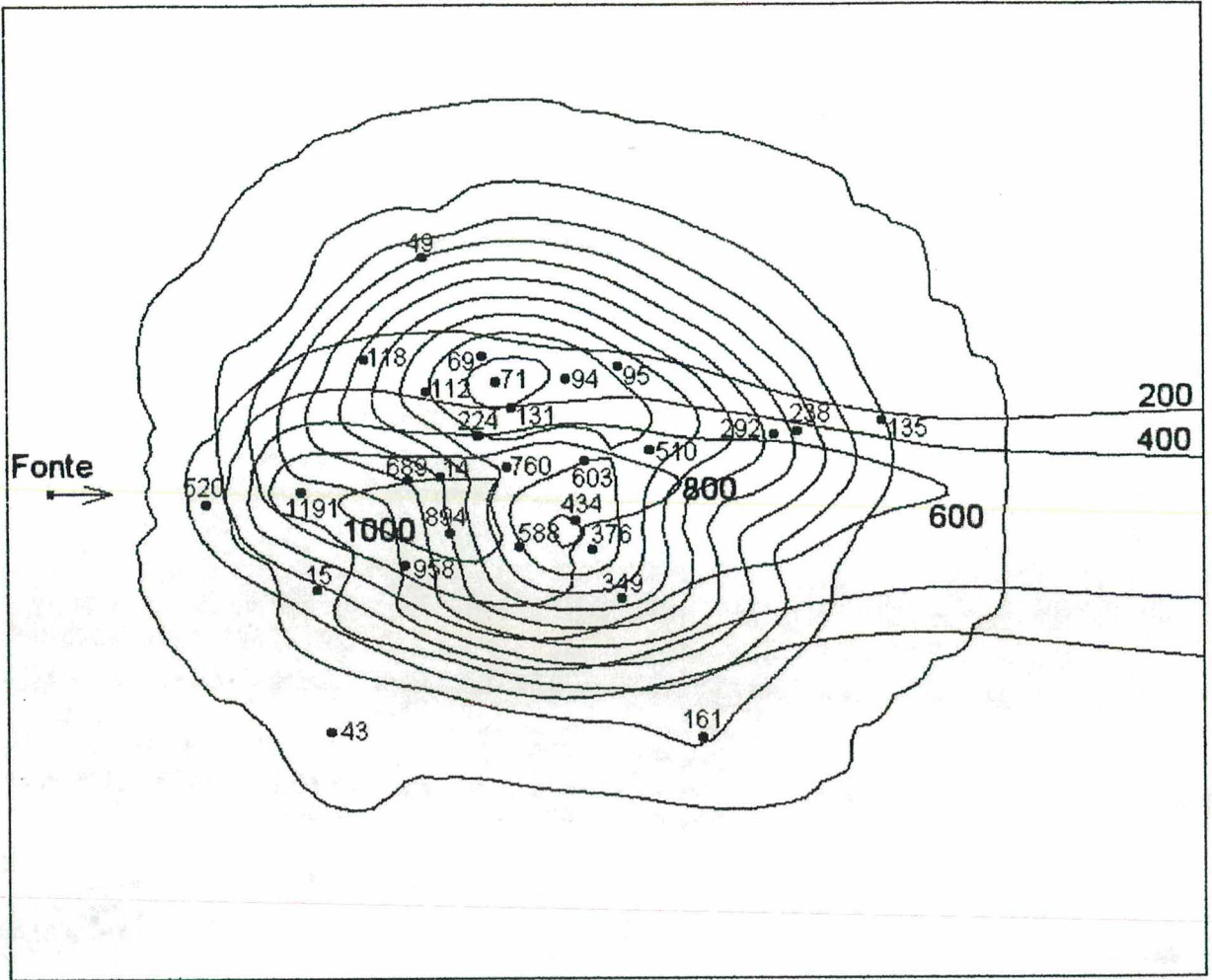


Figura 7.25 - CCB - concentração ao nível do solo - presente trabalho (acima) e Apsley (1997) (DV=127°) - valores em ppt

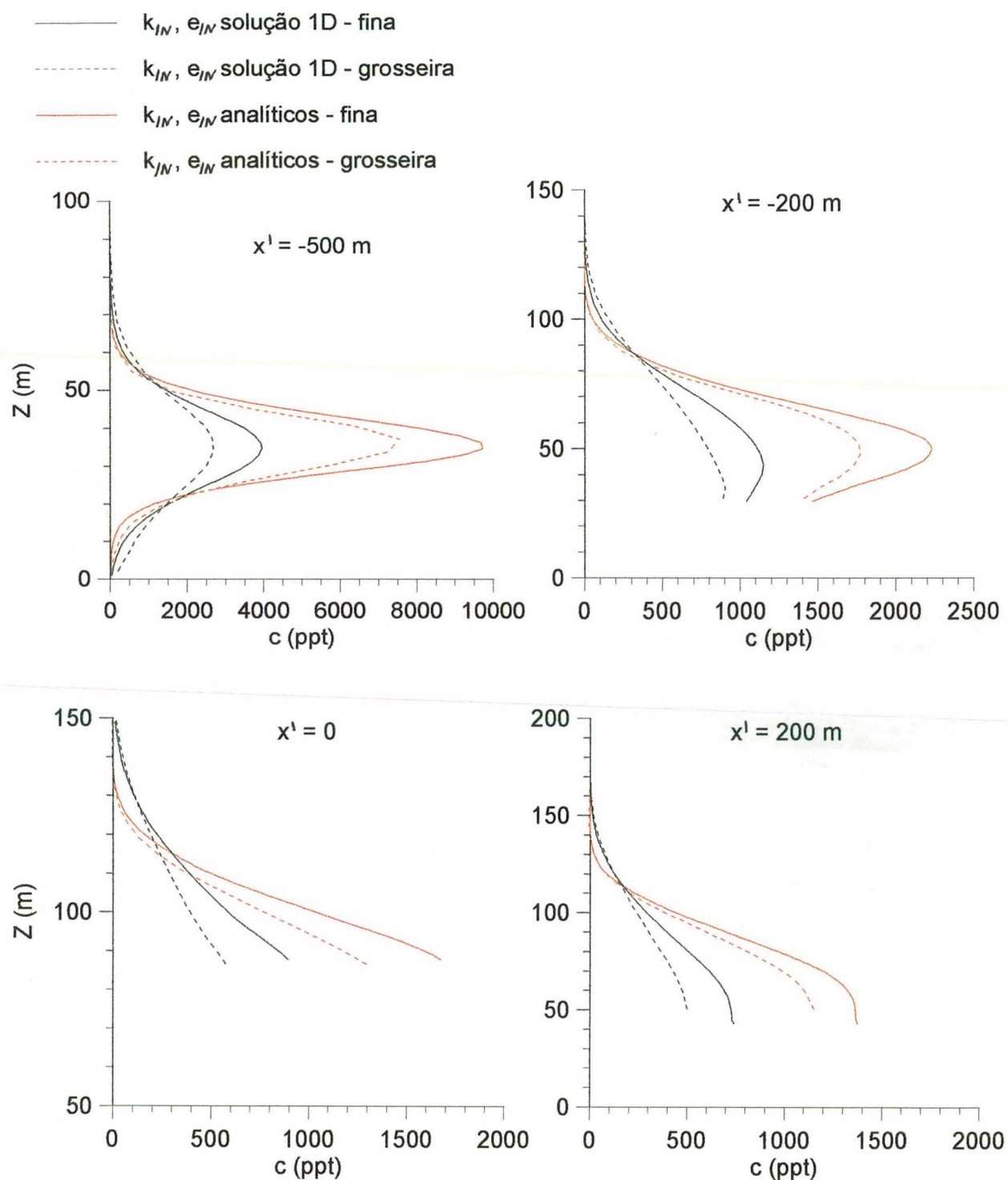


Figura 7.26 - CCB - Sensibilidade dos perfis de concentração aos níveis de turbulência a montante

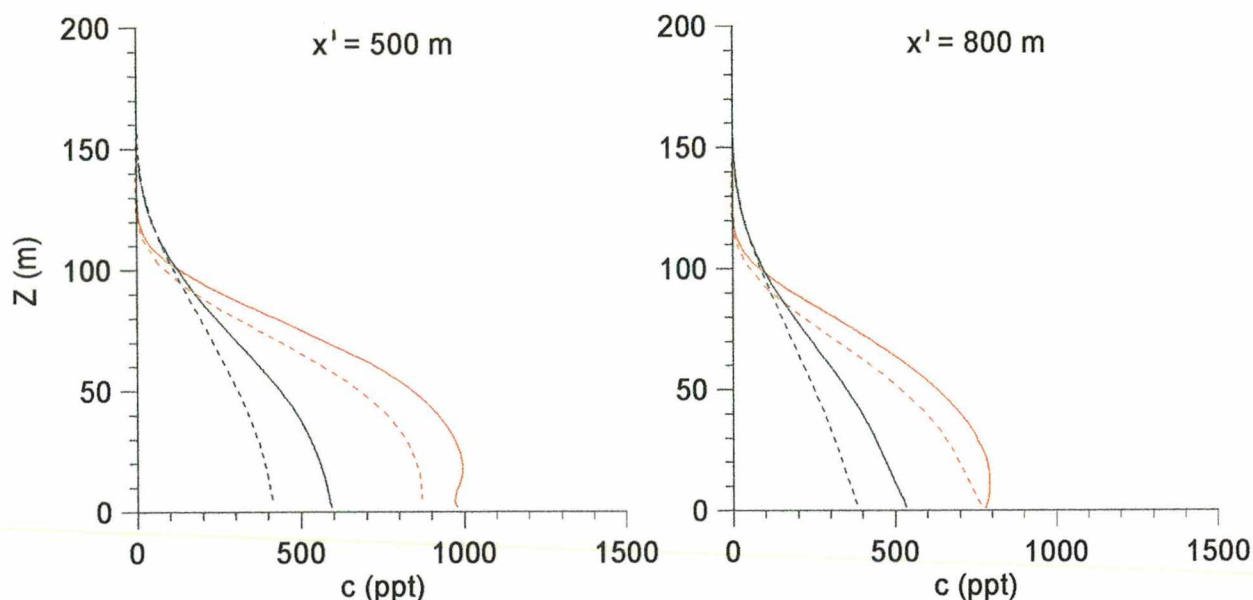


Figura 7.26 - CCB - Sensibilidade dos perfis de concentração aos níveis de turbulência a montante (continuação)

Para verificar a influência da direção do vento (DV) sobre os resultados de concentração, simulamos mais dois casos com direções levemente diferentes da média observada ($DV=127^\circ$). Os desvios foram de 5° e 10° , resultando nas novas direções $DV=122^\circ$ e $DV=117^\circ$. As demais condições de contorno foram mantidas as mesmas do caso $DV=127^\circ$. As malhas para esses novos experimentos numéricos também foram reconstruídas de modo a estarem alinhadas com a direção do vento na entrada. Os resultados de concentração ao nível do solo para essas novas direções de vento (juntamente com o resultado para $DV=127^\circ$) estão na figura 7.27. Note que uma mudança de direção de apenas 10° no vento a montante, deslocou a pluma para o outro lado de CCB. Esta grande sensibilidade do trajeto da pluma, nas proximidades do solo, com relação à direção do vento foi confirmada em laboratório (figura 7.27), através de um experimento em canal hidráulico realizado pela EPA (Snyder, 1990). Concluímos então, que devido à grande amplitude nas variações da direção do vento (nas primeiras dezenas de metros acima do solo), característico em condições de atmosfera estável, a dispersão de uma pluma e, consequentemente, o campo de concentrações médias em intervalos de tempo comuns de uma hora, não podem ser reproduzidos corretamente (do ponto de vista quantitativo) por experimentos numéricos ou de laboratório, nos quais as condições do escoamento a montante são mantidas uniformes durante o experimento. Para se almejar uma satisfatória corroboração (quantitativa) dos resultados de concentração através destes experimentos seria necessário realizar uma série deles, considerando uma matriz de distribuição das condições a montante, ao

menos com relação à intensidade e direção do vento, para então se compor o resultado final, ponderando todos os resultados individuais (através da matriz de distribuição).

Uma inspeção nos resultados revela que para $DV=127^\circ$ temos a melhor concordância entre os resultados numéricos e experimentais, especialmente com relação ao caminho seguido pela pluma. Esta é a direção média do vento observada durante a hora em que se realizou o experimento. Desta forma, concluímos que o modelo numérico tem habilidade de prever satisfatoriamente o trajeto da pluma, enquanto que a quantificação do campo de concentração deixa a desejar, pelo fato de que as variações das condições atmosféricas não foram consideradas (a média horária das flutuações na direção do vento medida a 10 m de altura, por exemplo, é de 26°). No caso de CCB, por exemplo, não há dados que permitam construir uma matriz de distribuição horária das condições do vento a montante.

Uma comparação entre os valores pontuais numéricos e experimentais para a concentração ao nível do solo pode ser vista na figura 7.28. Nota-se que o modelo numérico está superestimando a concentração ao nível do solo. Acreditamos que devido ao fato de que na realidade a direção do vento varia sensivelmente (ver figura 7.3), especialmente nos níveis mais próximos do solo, a pluma tem a sua dispersão aumentada, já que a mesma é convectada para direções diferentes, conforme a orientação do vento. Ainda na figura 7.28 podemos notar que os resultados são um pouco melhores no caso de k e ϵ prescritos na entrada a partir da solução do escoamento unidimensional, do que adotando-se os valores dados por expressões analíticas da literatura.

A questão da superestimação da difusão turbulenta próximo da fonte, discutida na seção 6.7.2, não pôde ser verificada no caso CCB, devido ao fato de que somente concentrações ao nível do solo foram medidas experimentalmente. Acreditamos que a análise física feita sobre esta deficiência do modelo, para os casos em túnel de vento, seja igualmente válida nos casos de dispersão em escala real. É necessário, porém, uma análise acerca do valor da constante empírica α ($=5$ para os casos de túnel de vento estudados). Percebemos aí uma grande dificuldade: obter-se dados de concentração de plumas em escala real, para diversas alturas e posições a jusante da fonte, os quais são imprescindíveis para que se possa determinar o crescimento da pluma nos seus estágios iniciais. No caso de CCB, apenas para efeito de comparação, empregamos o procedimento descrito na seção 6.7.2 (com $\alpha=5$) no caso com $DV=127^\circ$. Os resultados com e sem a redução da difusividade turbulenta próximo da fonte estão nas figuras 7.29 e 7.30.

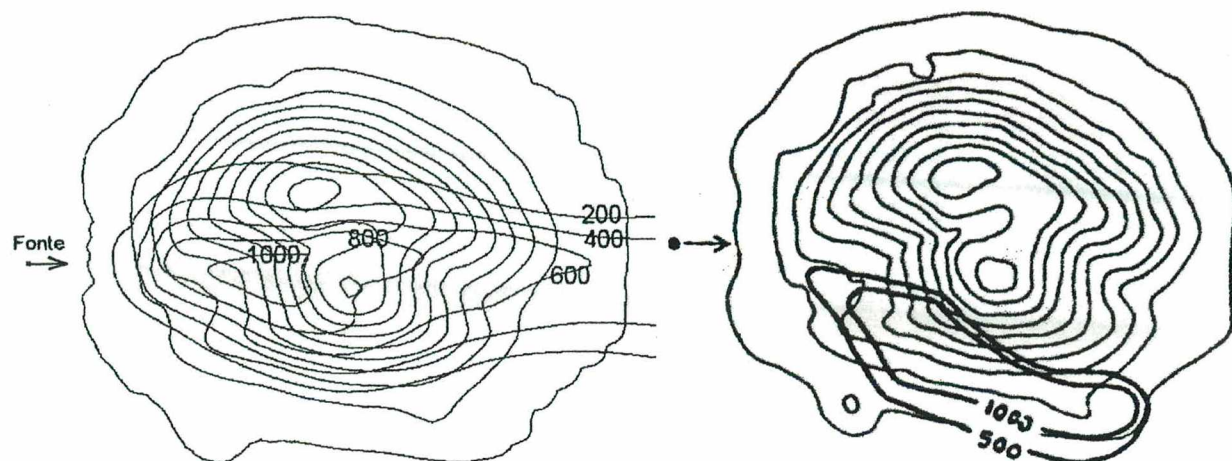
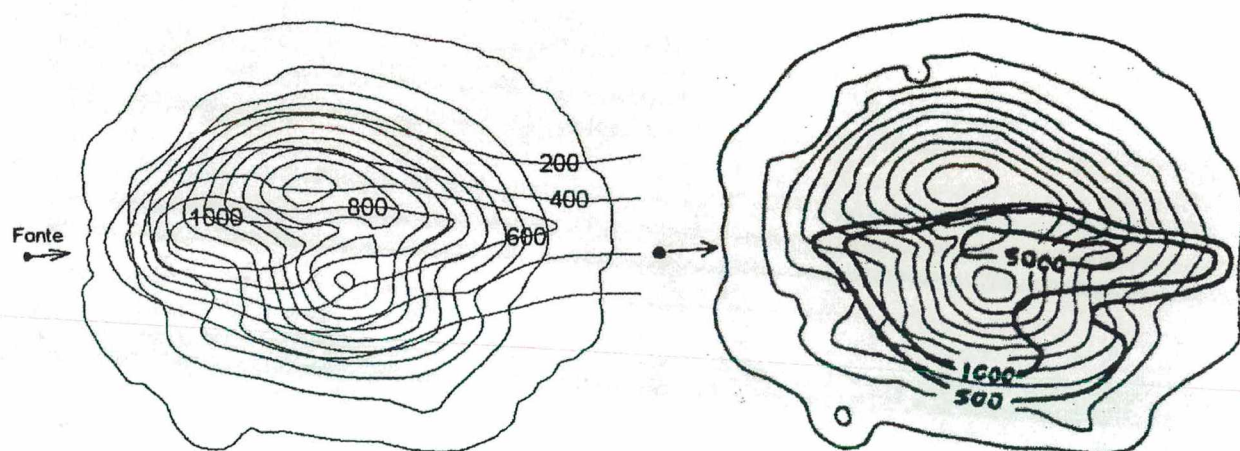
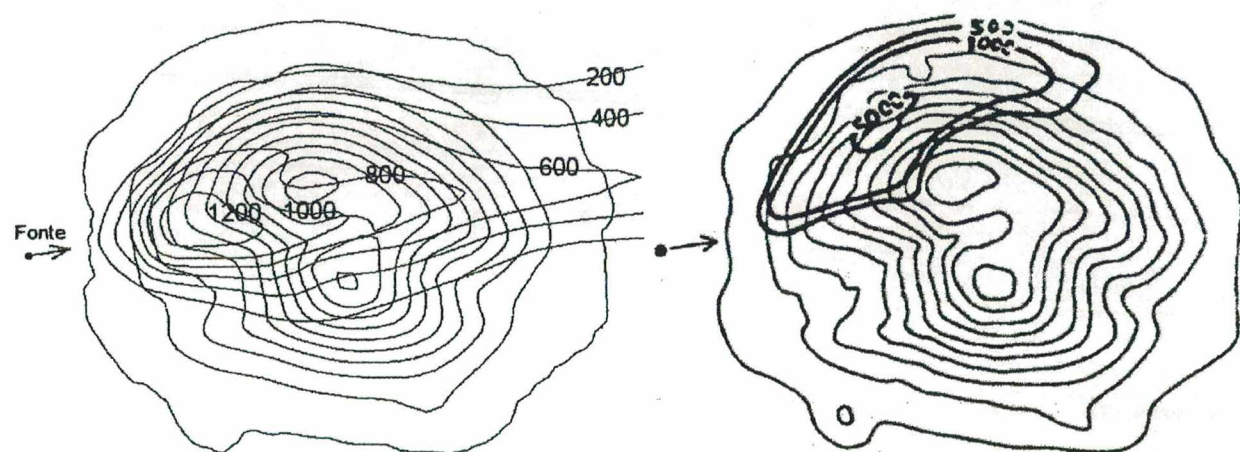
(a) $DV = 127^\circ$ (b) $DV = 122^\circ$ (c) $DV = 117^\circ$

Figura 7.27 - CCB - Sensibilidade com relação à direção do vento.
 Resultados numéricos (à esq.) e de laboratório (à dir.) - valores em ppt

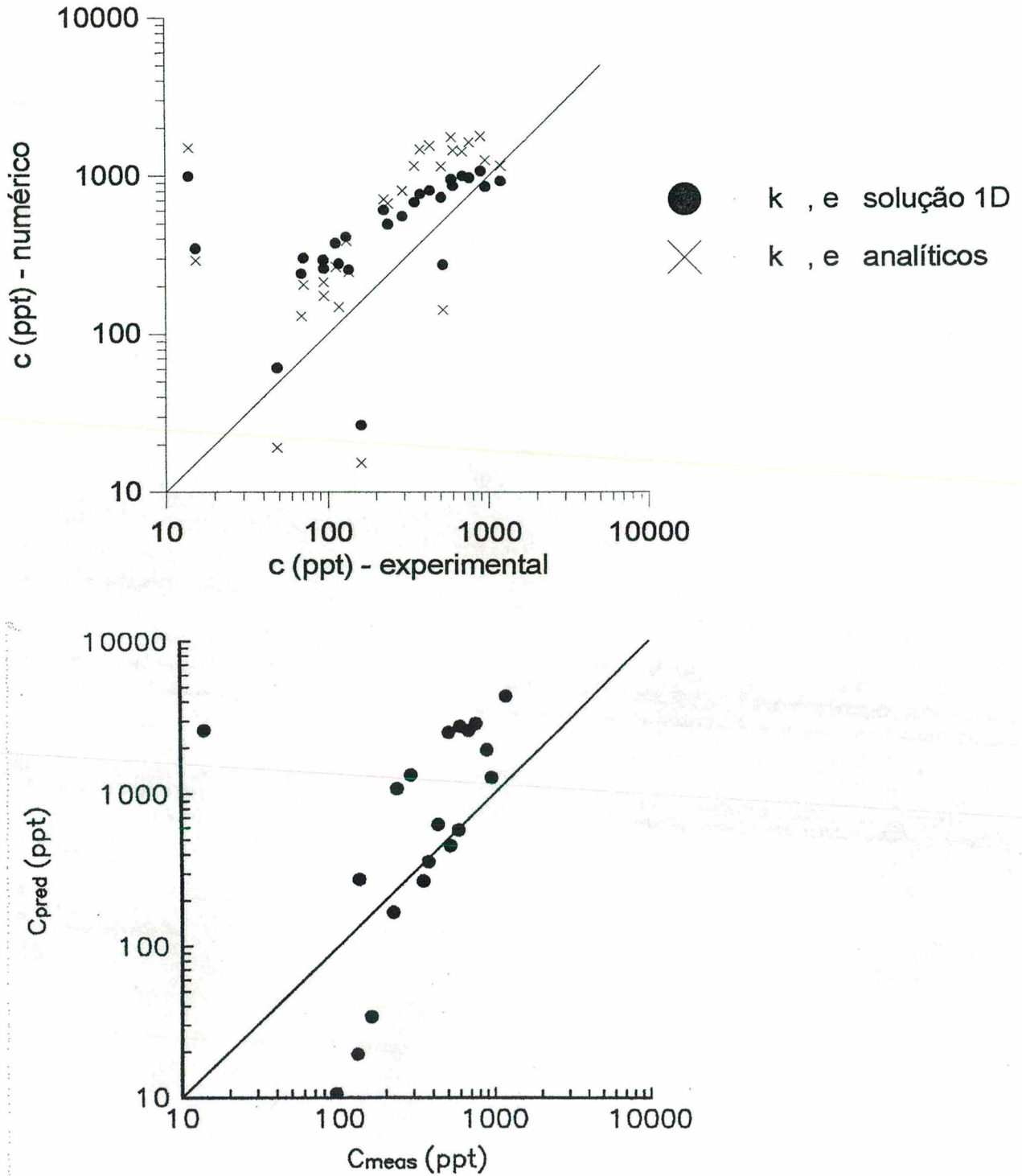


Figura 7.28 - CCB - Comparação entre as concentrações calculadas e medidas ao nível do solo
Presente trabalho (acima) e Apsley (1997) (abaixo)

Percebemos que os perfis de concentração foram bastante afetados próximo da fonte (posições $x^* = -500$ e -200 m na fig. 7.29), como esperado. No entanto, com relação à concentração ao nível do solo, a figura 7.30 mostra que os resultados são muito parecidos.

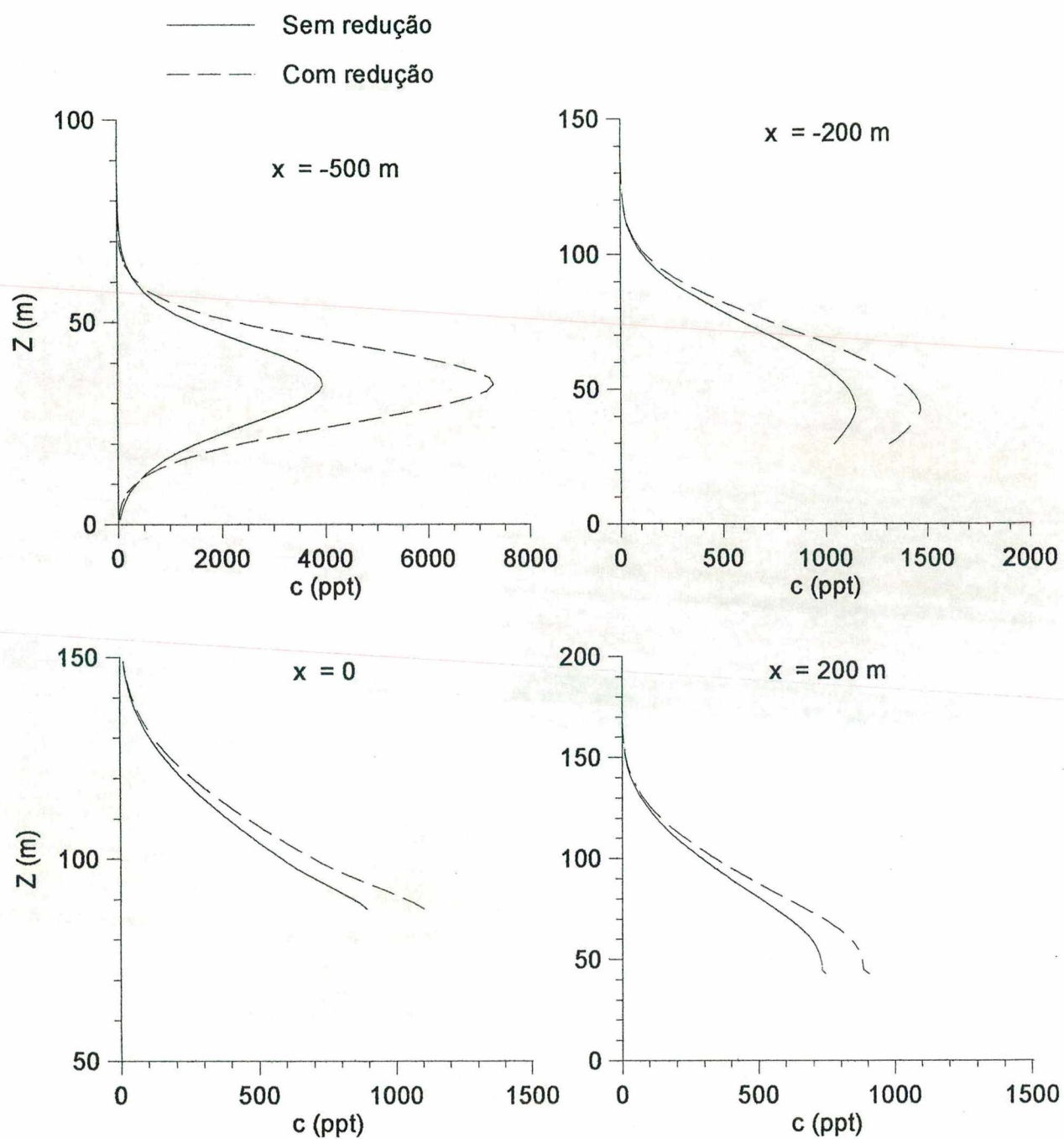


Figura 7.29 - CCB - Concentração com e sem redução da difusividade próximo da fonte
($DV=127^\circ$, plano $y' = -50$ m)

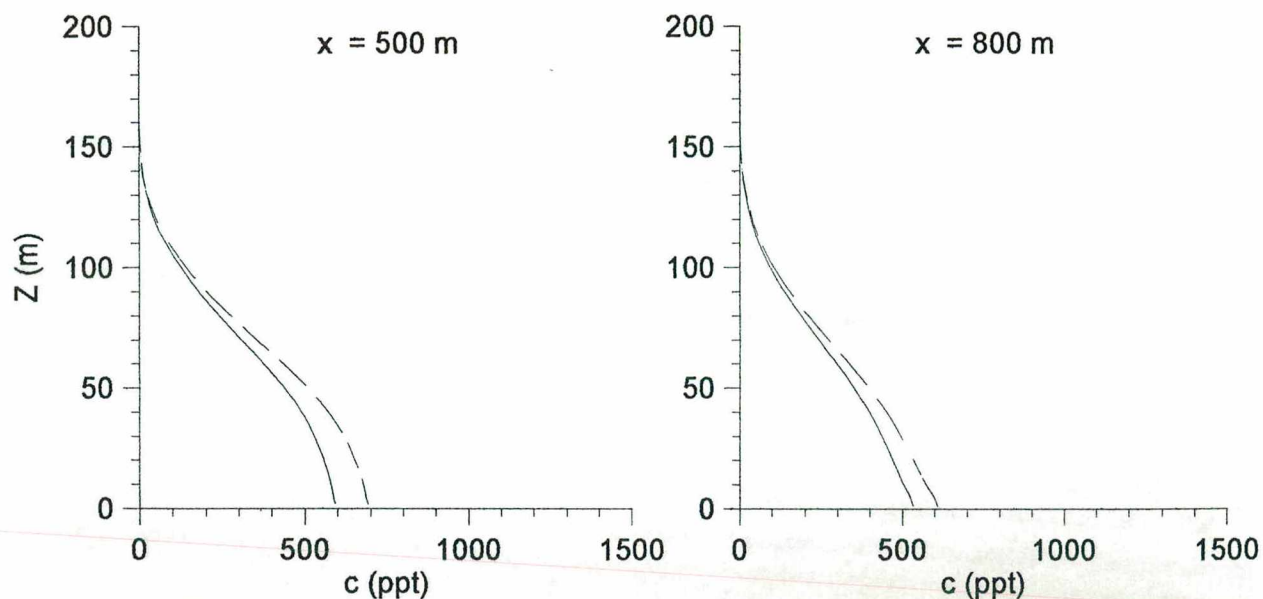


Figura 7.29 - CCB - Concentração com e sem redução da difusividade próximo da fonte ($DV=127^\circ$, plano $y' = -50$ m) - continuação

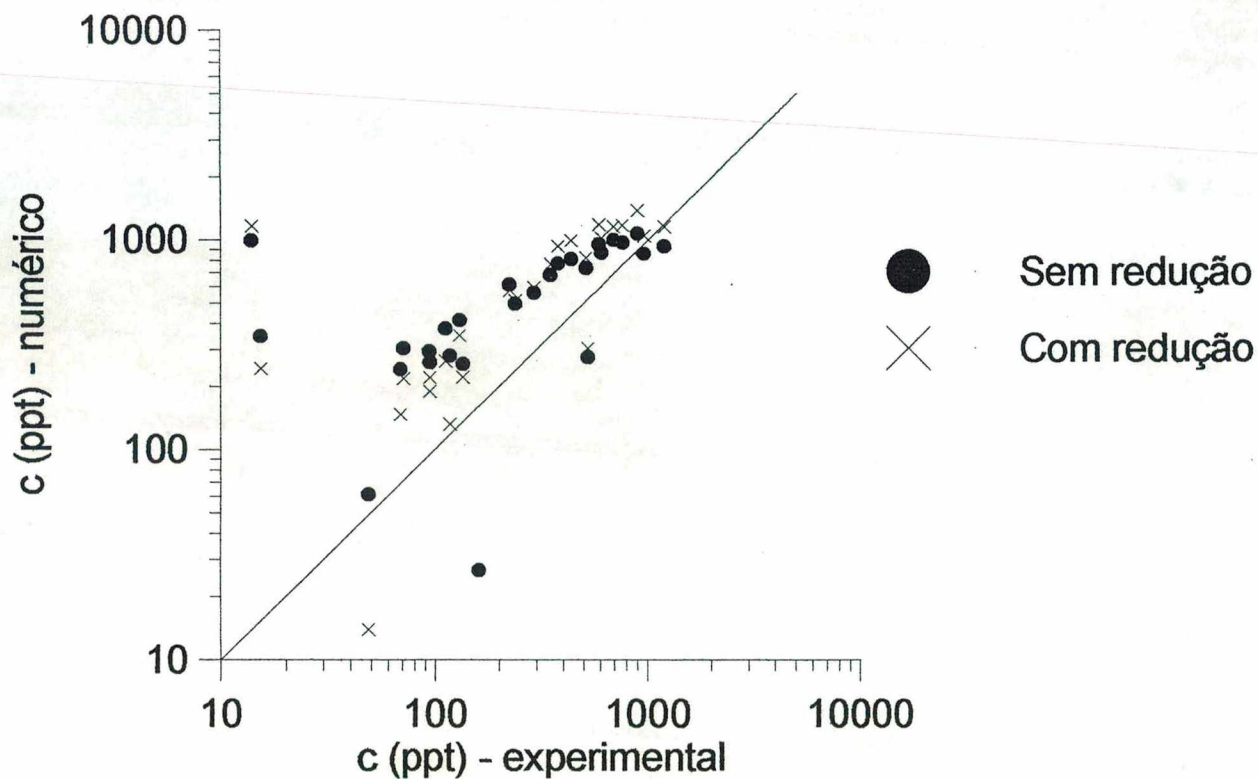


Figura 7.30 - CCB - Concentração ao nível do solo, com e sem redução da difusividade próximo da fonte ($DV=127^\circ$)

Para finalizar, na figura 7.31 está uma visão de topo de CCB, mostrando a porção do terreno afetada pela pluma. A figura 7.32 mostra a pluma numa secção longitudinal do problema, passando pelo pico norte de CCB.

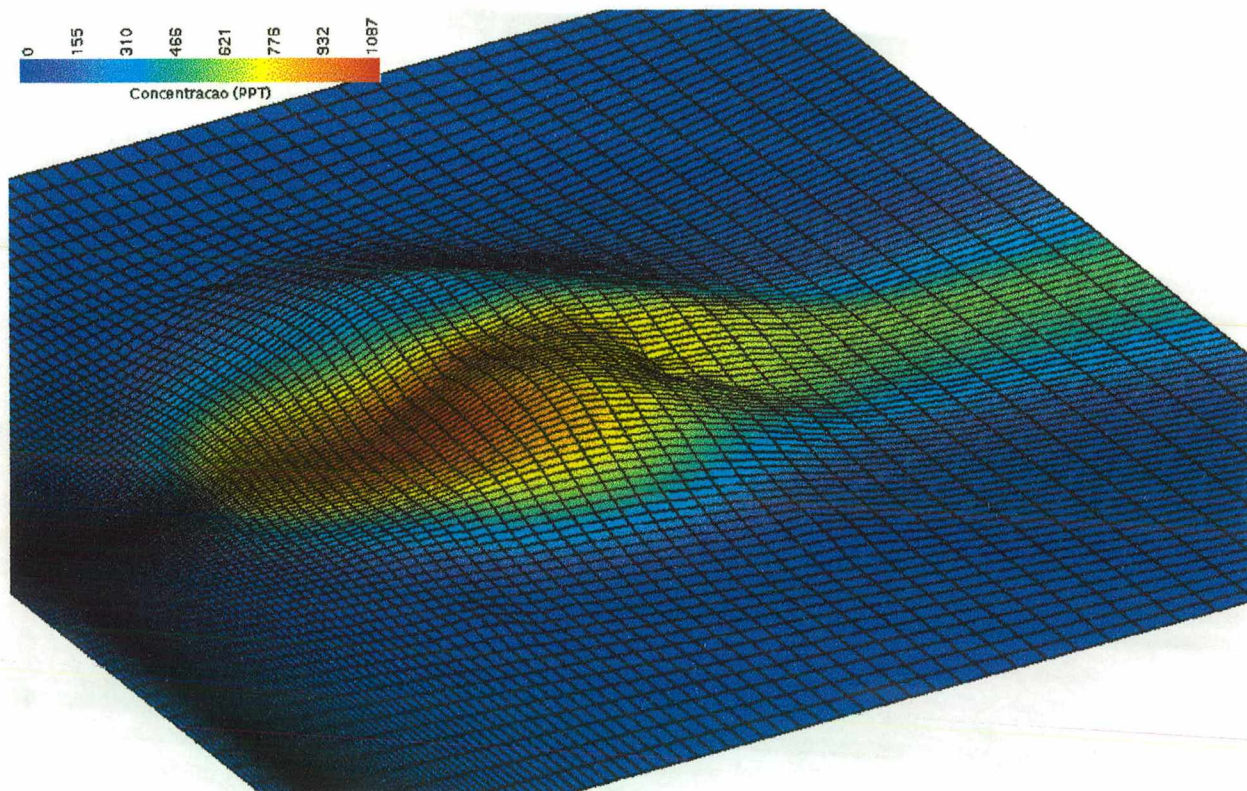


Figura 7.31 - CCB - Campo de concentrações (ppt) ao nível do solo (DV=127°)

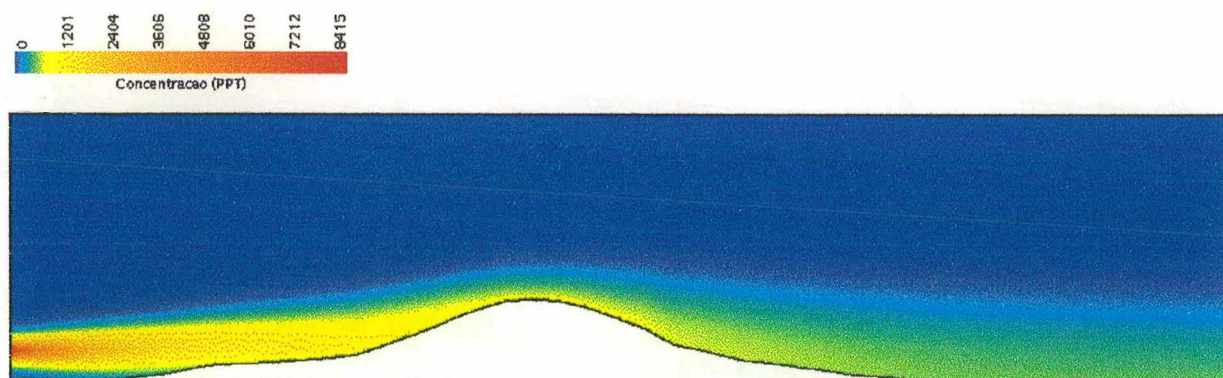


Figura 7.32 - CCB - Campo de concentrações (ppt) em um plano vertical passando pelo pico norte (DV=127°)

7.8 - Resumo do Capítulo

Neste capítulo o modelo numérico é aplicado à simulação de um experimento de dispersão em escala real (Cinder Cone Butte), e os resultados numéricos são comparados com os dados experimentais da EPA. São descritas as características do sítio e como foi conduzido o experimento de campo. O problema simulado numericamente corresponde a uma situação de atmosfera bastante estável (caso 206) e a topografia real de CCB é utilizada na construção das malhas. O modelo k - ϵ anisotrópico é empregado para o cálculo das difusividades turbulentas. As condições de contorno para velocidade e temperatura à montante são prescritas a partir de dados experimentais, enquanto que k e ϵ são prescritos naquela fronteira a partir da solução das contrapartes unidimensionais (na direção vertical) das equações governantes, considerando condição de escoamento não perturbado a montante. Os erros associados à dependência de malha foram quantificados pelo índice de convergência de malha (GCI). Os resultados numéricos mostraram aspectos interessantes observados experimentalmente, como a grande divergência lateral do escoamento próximo do solo, no sentido de contornar a montanha. Para a concentração, os resultados numéricos mostram também a divergência lateral da pluma. Valores da concentração ao nível do solo obtidos numericamente são comparados com valores experimentais e também com valores numéricos obtidos por Apsley (1997). Constata-se que o caminho percorrido pela pluma foi adequadamente previsto pelo modelo e que ambos os resultados numéricos tendem a superestimar os valores de concentração. É verificada também a influência do nível de turbulência e da direção do vento prescritos a montante sobre os resultados de concentração.

CAPÍTULO OITO

CONCLUSÃO

Esta tese é o desfecho de um longo e exaustivo trabalho de aprofundamento na formação técnico-científica do autor. Os objetivos principais desta, os quais foram mais detalhadamente expostos no capítulo um, em resumo, são o desenvolvimento, a implementação e a verificação da performance de um modelo numérico tridimensional para a previsão do escoamento e da dispersão de plumas na CLA. Os sete capítulos precedentes foram dedicados à descrição do problema físico, revisão da literatura pertinente, apresentação do modelo matemático e da metodologia numérica para resolvê-lo, verificação dos códigos computacionais implementados, aplicação do modelo na simulação de experimentos em túnel de vento e em escala real, comparação dos resultados e discussão das habilidades e limitações do modelo numérico desenvolvido.

A dificuldade principal para o cálculo de escoamentos atmosféricos com sucesso está nos efeitos do caráter turbulento do fenômeno. A utilização de modelos mais complexos - e potencialmente superiores - como o das tensões de Reynolds, ainda é proibitivo para geometrias tridimensionais complexas, freqüentemente encontradas nos problemas de engenharia. Desta forma, os modelos a duas equações baseados na difusividade turbulenta são os mais adequados atualmente. No caso da CLA, o modelo $k-\epsilon$ clássico produz resultados bastante satisfatórios para o escoamento, mas não para a dispersão, especialmente em atmosfera estável. O caminho é a utilização de variantes do $k-\epsilon$, as quais mantêm a “suficiente simplicidade” que viabiliza os seus empregos em problemas tridimensionais complexos, e ao mesmo tempo permite incorporar

fenômenos intrínsecos do problema. No caso atmosférico, a anisotropia das difusividades turbulentas é um aspecto importante na dispersão de plumas. Estendemos a aplicação do modelo $k-\epsilon$ anisotrópico desenvolvido por Koo (1993), a partir do modelo 2.5 de Mellor e Yamada (1982), para problemas tridimensionais na CLA. Além disso, foi discutida uma série de fenômenos atmosféricos que podem interferir no escoamento e na dispersão, e também foram apresentadas as formas de inclusão desses fenômenos no modelo matemático. No entanto, devido à carência de resultados experimentais e também, por que não dizer, à escassez de tempo para a execução dos numerosos testes necessários, não foi possível verificar a performance do modelo de dispersão com relação, por exemplo, à remoção seca e úmida, deposição de material particulado e reações químicas.

A nova variante anisotrópica do $k-\epsilon$, ora proposta, foi implementada no código computacional NAVIER, utilizando volumes finitos em coordenadas curvilíneas não ortogonais. Outras alterações foram necessárias no código original (que se prestava à solução de escoamentos laminares a qualquer velocidade) para a sua adequação a problemas atmosféricos. Implementamos também o programa SMOKE para a solução da equação da concentração, considerando um campo anisotrópico de difusividades turbulentas. Também foram implementados outros programas auxiliares de construção de malhas para o escoamento e a concentração sobre topografia complexa (TOPOGRID), e para a interpolação de variáveis entre malhas (INTERGRID). A preocupação com relação à precisão da solução numérica traduziu-se no emprego de uma função de interpolação de alta ordem (QUICK), e para não nos limitarmos a análises qualitativas ou visuais sobre a independência de malha, implementamos o programa GRIDCON, para quantificar os erros da solução, através do cálculo do índice de convergência de malha (GCI).

Como o programa permite também a opção do $k-\epsilon$ clássico, foram simulados alguns problemas para comparação com a literatura, como o escoamento turbulento (com e sem transferência de calor) entre placas paralelas, jatos e plumas planos e o escoamento sobre o monte Askervein. Finalmente, o modelo numérico foi aplicado para a simulação de problemas de dispersão. Seis casos envolvendo problemas em escala reduzida (experimentos em túnel de vento) foram reproduzidos numericamente. Classes de estabilidade neutra e estável foram estudados. Uma importante deficiência no modelo foi constatada e analisada. Uma solução foi proposta para a questão da superestimação da difusão da pluma nas proximidades da fonte, a

qual foi testada e contribuiu significativamente para a melhoria da concordância com os resultados experimentais de concentração.

O caso real de Cinder Cone Butte representa o maior desafio encontrado. Não como ocorre nos experimentos individuais em laboratório ou em computadores, as condições atmosféricas reais apresentam constantes e imprevisíveis variações com o tempo. Em médias extraídas a partir de medições, seja durante intervalos de dez minutos ou de uma hora (como em CCB), as variáveis meteorológicas apresentam grandes desvios nas primeiras dezenas de metros acima do solo, especialmente sob condições de estratificação estável. De fato, nem é necessário que nos reportemos a dados medidos em campo. Qualitativamente, basta nos retirarmos da calmaria atmosférica reinante no interior de nossas casas ou escritórios para o espaço livre de um campo aberto, e podemos experimentar na pele o aparente (senão real ...) caos dos ventos que sopram com intensidades e direções em contínua mudança. Observo agora, através da janela a minha frente, árvores próximas com uns 5 ou 6 metros de altura cujos galhos estão estagnados e percebo apenas um pequeno movimento nas folhas. Ao mesmo tempo, mais adiante vejo a copa de outra árvore, bem mais alta que as primeiras (talvez com uns 15 m de altura), sendo impetuosa e intermitentemente agitada pelo vento acima. A agitação lá em cima, porém, não é constante mas intercala-se (poderia dizer aleatoriamente) com períodos de calmaria. Como então tentar prever determinística ou estatisticamente um comportamento tão complexo? A tentativa de reproduzir em laboratório ou por simulação computacional problemas reais de escoamento e dispersão na atmosfera é um grande desafio. Na área de simulação numérica se faz, muitas vezes, modelos tridimensionais complexos sem realidade física, quer dizer, tratando o problema de mecânica dos fluidos sem a devida atenção aos fenômenos atmosféricos que interferem no escoamento e na dispersão de poluentes. Este trabalho é uma tentativa de associar modelos numéricos sofisticados com a complicadíssima física atmosférica.

Após alguns meses de trabalho na simulação do caso específico de Cinder Cone Butte e a leitura de dezenas de trabalhos da área de dispersão atmosférica ao longo do período de realização deste trabalho, temos a clara impressão de que há ainda muito o que ser feito com relação ao estudo dos escoamentos atmosféricos, seja a nível de laboratório físico ou computacional, como também, senão ainda mais importante, a realização de experimentos em escala real.

Mesmo sob a realidade ainda desencorajante dos resultados quantitativamente pouco satisfatórios (quando comparados a margens de erro de meros 10 ou 20% obtidos no

modelamento de outros fenômenos físicos), os experimentos em escala reduzida e as simulações numéricas constituem importante e imprescindível ferramenta de projeto para problemas atmosféricos de engenharia ambiental. A verdade é que, por mais deficientes que alguém os possa julgar, ainda são o melhor que se pode fazer !

8.1 - Perspectivas para Trabalhos Futuros

Nenhuma parte desta tese poderia apresentar-se mais descomplicada (e farta de idéias) para ser escrita quanto esta seção. Nas conclusões acima expostas, deixamos claro o nosso pensamento acerca do longo caminho - repleto de desafios e dificuldades - que os analistas numéricos de problemas atmosféricos, no caso ligados ao escoamento e à dispersão, devem encontrar durante o desenvolvimento e a defesa de seus modelos. Há, como já dissemos, muito o que ser feito, especialmente em nosso país, onde a preocupação com a questão ambiental começa a se transferir somente nesses últimos anos da retórica para a lei. Considerando as ambições iniciais deste trabalho, as quais ainda não puderam ser satisfeitas em sua totalidade, delineamos a seguir os próximos passos que significam a continuidade natural deste trabalho.

Fazem-se necessários estudos de casos com estratificação instável. Ainda que do ponto de vista aplicativo os casos estáveis sejam os mais potencialmente perigosos do ponto de vista de níveis de concentração, há situações em que o aumento significativo da difusão turbulenta na direção vertical (típico de atmosfera instável) provoca uma antecipação grande na posição de impacto da pluma com o solo. Isto pode ocasionar problemas devido a altos níveis de concentração no chão, nas proximidades da fonte.

Ao lado da turbulência e estratificação do escoamento, da topografia do terreno, dos perfis de velocidade e variáveis turbulentas a montante da fonte, os quais foram estudados nos casos simulados, há outros fatores a serem considerados. No capítulo três discutimos os fenômenos físicos que influenciam a dispersão de poluentes na atmosfera. Além disso, foi demonstrado como é possível levar para dentro do modelo numérico a consideração desses fenômenos, sem grande complexidade. Resta então conduzir estudos de casos incluindo esses fenômenos. A dificuldade, por enquanto, está na corroboração do modelo com resultados experimentais. No entanto, independente da questão da verificação do modelo, estudos de

problemas idealizados podem ser realizados. Entre eles, estudos em separado e em conjunto considerando:

- Deposição seca de poluentes, através de sua absorção pelo solo, caracterizada pela velocidade de deposição;

- Deposição úmida de poluentes, através da lavagem por chuvas, caracterizada pelo coeficiente de lavagem;

- Dispersão de material particulado, e sua conseqüente deposição, caracterizados pelas velocidades terminal e de deposição;

- Interação da descarga pela fonte com o escoamento: nas emissões industriais, geralmente os contaminantes são descarregados na atmosfera através de um jato. Na região de descarga, o jato interage com o escoamento na CLA. Encontra-se aí um grande (e certamente complicado) filão para pesquisa. É possível verificar através da simulação computacional o quão importante é a solução do complexo escoamento na região da descarga da pluma para a previsão do campo de concentração, especialmente ao nível do solo.

- Estudo das reações químicas: os modelos de dispersão em larga escala incorporam um sofisticado módulo químico. No caso da dispersão na microescala, certamente não há necessidade de se considerar tantas substâncias e reações como ocorre nos modelos regionais. No entanto, em diversos problemas de engenharia, as emissões podem se constituir de substâncias cujas constantes de reação sejam altas o suficiente a ponto de que as possíveis reações químicas com outros poluentes ou componentes do ar possam interferir de maneira significativa no campo de concentração, já nas primeiras centenas de metros. Mais uma vez, a simulação de casos com reações químicas, mesmo que hipotéticos, poderá fornecer subsídios para uma avaliação quantitativa dos efeitos das reações na dispersão de plumas na microescala atmosférica.

APÊNDICE A - Obtenção do Modelo k-ε Anisotrópico

As equações de transporte para as tensões de Reynolds e os fluxos difusivos turbulentos são (Mellor e Yamada, 1982)

$$\frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(C_s \frac{k}{\varepsilon} \overline{u'_k u'_l} \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_l} \right) + P_{ij} + G_{ij} + \phi_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \varepsilon \quad (A.1)$$

$$\frac{\partial \overline{u'_i \theta'}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \overline{u'_i \theta'}}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(C'_s \frac{k}{\varepsilon} \overline{u'_k u'_l} \frac{\partial \overline{u'_i \theta'}}{\partial x_l} \right) - \overline{u'_i u'_k} \frac{\partial \theta}{\partial x_k} + P_{iT} + G_{iT} + \phi_{iT} \quad (A.2)$$

$$\frac{\partial \overline{\theta'^2}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \overline{\theta'^2}}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(C'_T \frac{k}{\varepsilon} \overline{u'_k u'_l} \frac{\partial \overline{\theta'^2}}{\partial x_l} \right) - 2 \overline{u'_k \theta'} \frac{\partial \theta}{\partial x_k} - \frac{1}{R} \frac{\overline{\theta'^2}}{k} \varepsilon \quad (A.3)$$

Desprezando os termos transientes, convectivos e difusivos nas equações acima, obtém-se as equações algébricas para os fluxos turbulentos (Rodi, 1985)

$$P_{ij} + G_{ij} + \phi_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \varepsilon = 0 \quad (A.4)$$

$$-\overline{u'_i u'_k} \frac{\partial \theta}{\partial x_k} + P_{iT} + G_{iT} + \phi_{iT} = 0 \quad (A.5)$$

$$-2 \overline{u'_k \theta'} \frac{\partial \theta}{\partial x_k} - \frac{1}{R} \frac{\overline{\theta'^2}}{k} \varepsilon = 0 \quad (A.6)$$

Os termos P_{ij} , G_{ij} , P_{iT} e G_{iT} representam a produção de $\overline{u'_i u'_j}$ e $\overline{u'_i \theta'}$ por efeitos de cisalhamento e empuxo do escoamento médio.

$$P_{ij} = - \left(\overline{u'_i u'_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \overline{u'_j u'_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) \quad (A.7)$$

$$G_{ij} = -\beta (g_i \overline{u'_j \theta'} + g_j \overline{u'_i \theta'}) \quad (A.8)$$

$$P_{iT} = -\overline{u'_k \theta'} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \quad (A.9)$$

$$G_{iT} = -\beta \overline{\theta'^2} g_i \quad (A.10)$$

ϕ_{ij} e ϕ_{iT} são os termos de *pressure-strain*. Gibson e Launder (1978) propuseram correções para os efeitos de parede nos termos de redistribuição pressão-velocidade porque há significativas diferenças na razão das variâncias horizontal e vertical entre a região próxima à parede (camada limite) e a região afastada (escoamento livre). Uma explicação teórica para essa diferença é devido à influência da proximidade da parede sobre a redistribuição pressão-velocidade.

$$\phi_{ij} = \phi_{ij,1} + \phi_{ij,2} + \phi_{ij,3} + \phi'_{ij,1} + \phi'_{ij,2} + \phi'_{ij,3} \quad (A.11)$$

$$\phi_{iT} = \phi_{iT,1} + \phi_{iT,2} + \phi_{iT,3} + \phi'_{iT,1} + \phi'_{iT,2} + \phi'_{iT,3} \quad (A.12)$$

O esquema de Launder e Gibson tem termos representando interações turbulentas não lineares ($\phi_{ij,1}$ e $\phi_{iT,1}$), interação devido ao cisalhamento do escoamento médio ($\phi_{ij,2}$ e $\phi_{iT,2}$) e interações devido a efeitos de empuxo ($\phi_{ij,3}$ e $\phi_{iT,3}$). Os termos com apóstrofo (') representam a contribuição do solo (parede) nas redistribuições de pressão.

$$\phi_{ij,1} = -c_1 \frac{\varepsilon}{k} \left(\overline{u'_i u'_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} k \right) \quad (A.13)$$

$$\phi_{ij,2} = -c_2 \left(P_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} P \right) \quad (A.14)$$

$$\phi_{ij,3} = -c_3 \left(G_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} G \right) \quad (A.15)$$

$$\phi'_{ij,1} = c'_1 \frac{\varepsilon}{k} \left(\overline{u'_k u'_m} n_k n_m \delta_{ij} - \frac{3}{2} \overline{u'_k u'_i} n_k n_j - \frac{3}{2} \overline{u'_k u'_j} n_k n_i \right) f \left(\frac{l}{x_i n_i} \right) \quad (A.16)$$

$$\phi'_{ij,2} = c'_2 \left(\phi_{km,2} n_k n_m \delta_{ij} - \frac{3}{2} \phi_{ki,2} n_k n_j - \frac{3}{2} \phi_{kj,2} n_k n_i \right) f \left(\frac{l}{x_i n_i} \right) \quad (A.17)$$

$$\phi'_{ij,3} = c'_3 \left(\phi_{km,3} n_k n_m \delta_{ij} - \frac{3}{2} \phi_{ki,3} n_k n_j - \frac{3}{2} \phi_{kj,3} n_k n_i \right) f \left(\frac{l}{x_i n_i} \right) \quad (A.18)$$

$$\phi_{iT,1} = -c_{iT} \frac{\varepsilon}{k} \overline{u_i' \theta'} \quad (\text{A.19})$$

$$\phi_{iT,2} = -c_{2T} P_{iT} \quad (\text{A.20})$$

$$\phi_{iT,3} = -c_{3T} G_{iT} \quad (\text{A.21})$$

$$\phi'_{iT,1} = c'_{iT} \frac{\varepsilon}{k} \overline{u_k' \theta'} n_i n_k f\left(\frac{l}{x_i n_i}\right) \quad (\text{A.22})$$

$$\phi'_{iT,2} = c'_{2T} c_{2T} P_{kT} n_i n_k f\left(\frac{l}{x_i n_i}\right) \quad (\text{A.23})$$

$$\phi'_{iT,3} = c'_{3T} c_{3T} G_{kT} n_i n_k f\left(\frac{l}{x_i n_i}\right) \quad (\text{A.24})$$

onde $P = 0.5 P_{ii}$ e $G = 0.5 G_{ii}$. As constantes são de Rodi (1985) e estão na tabela A.1. Nas

equações acima, ' \mathbf{n} ' é o vetor unitário normal à superfície. O argumento da função $f\left(\frac{l}{x_i n_i}\right)$

representa a razão entre o comprimento de escala da turbulência e a distância à superfície. O papel da função f é reduzir a influência das correções na região distante da superfície. É usual escolher-se uma função linear normalizada de tal forma que f é igual à unidade na região de equilíbrio local próxima do solo e zero próxima da superfície livre. A função de efeito parede (f) é obtida de Gibson e Launder (1978).

$$f = \frac{l}{k_v z} = \frac{C_\varepsilon k^{3/2}}{k_v z \varepsilon} \quad (\text{A.25})$$

Na expressão acima a hipótese de Kolmogorov, que relaciona a taxa de dissipação com o comprimento de escala, é utilizada. $C_\varepsilon = 0.13$ é utilizado.

c_1	c_2	c_3	c'_1	c'_2	c'_3	c_{1T}	c_{2T}	c_{3T}	c'_{1T}	c'_{2T}	c'_{3T}	R
2.2	0.55	0.55	0.5	0.3	0	3.0	0.5	0.5	0.5	0	0	0.8

Tabela A.1 - Constantes do modelo k- ε anisotrópico

Experiências iniciais usando este modelo indicaram que são necessárias modificações para descrever efeitos de flutuações de pressão para escoamentos com superfície livre (Celik e Rodi, 1984). Isso é verdadeiro mesmo no escoamento sem estratificação em canal aberto onde uma redução adicional da variância transversal ocorre próximo da superfície livre. Decorre ser necessária uma modificação também nas equações de fluxo de escalares.

Após aplicada a aproximação de camada limite às equações (A.4) e (A.5), as equações do modelo algébrico de tensões tornam-se

$$\overline{u'^2} = \frac{2}{3} \frac{c_1 - 1}{c_1} k + \frac{c_1'}{c_1} f \overline{w'^2} - \frac{k}{c_1 \varepsilon} \left(E_1 \overline{u'w'} \frac{\partial u}{\partial z} + E_2 \overline{v'w'} \frac{\partial v}{\partial z} - E_3 g \beta \overline{w'\theta'} \right) \quad (A.26)$$

$$\overline{v'^2} = \frac{2}{3} \frac{c_1 - 1}{c_1} k + \frac{c_1'}{c_1} f \overline{w'^2} - \frac{k}{c_1 \varepsilon} \left(E_2 \overline{u'w'} \frac{\partial u}{\partial z} + E_1 \overline{v'w'} \frac{\partial v}{\partial z} - E_3 g \beta \overline{w'\theta'} \right) \quad (A.27)$$

$$\overline{w'^2} = \frac{2}{3} \frac{c_1 - 1}{E_4} k - \frac{k}{E_4 \varepsilon} \left(E_5 \overline{u'w'} \frac{\partial u}{\partial z} + E_5 \overline{v'w'} \frac{\partial v}{\partial z} - E_6 g \beta \overline{w'\theta'} \right) \quad (A.28)$$

$$\overline{u'w'} = \frac{k}{\varepsilon} \left(-E_7 \overline{w'^2} \frac{\partial u}{\partial z} + E_8 g \beta \overline{u'\theta'} \right) \quad (A.29)$$

$$\overline{v'w'} = \frac{k}{\varepsilon} \left(-E_7 \overline{w'^2} \frac{\partial v}{\partial z} + E_8 g \beta \overline{v'\theta'} \right) \quad (A.30)$$

$$\overline{u'v'} = -\frac{k}{\varepsilon} \frac{1 - c_2}{c_1} \left(\overline{u'w'} \frac{\partial v}{\partial z} + \overline{v'w'} \frac{\partial u}{\partial z} \right) \quad (A.31)$$

$$\overline{u'\theta'} = -\frac{1}{c_{IT}} \frac{k}{\varepsilon} \left(\overline{u'w'} \frac{\partial \theta}{\partial z} + (1 - c_{2T}) \overline{w'\theta'} \frac{\partial u}{\partial z} \right) \quad (A.32)$$

$$\overline{v'\theta'} = -\frac{1}{c_{IT}} \frac{k}{\varepsilon} \left(\overline{v'w'} \frac{\partial \theta}{\partial z} + (1 - c_{2T}) \overline{w'\theta'} \frac{\partial v}{\partial z} \right) \quad (A.33)$$

$$\overline{w'\theta'} = -\frac{1}{c_{IT} + c_{IT}'} \frac{k}{\varepsilon} \left(\overline{w'^2} \frac{\partial \theta}{\partial z} - E_9 g \beta \overline{\theta'^2} \right) \quad (A.34)$$

$$\overline{\theta'^2} = -\frac{2}{E_{10}} \frac{k}{\varepsilon} \overline{w'\theta'} \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (\text{A.35})$$

onde as constantes são

$$\begin{aligned} E_1 &= 2 - \frac{4}{3}c_2 + \frac{2}{3}c_2c_2'f \\ E_2 &= \frac{2}{3}c_2 + \frac{2}{3}c_2c_2'f \\ E_3 &= \frac{2}{3}c_3 - \frac{4}{3}c_3c_3'f \\ E_4 &= c_1 + 2c_1'f \\ E_5 &= \frac{2}{3}c_2 - \frac{4}{3}c_2c_2'f \\ E_6 &= 2 - \frac{4}{3}c_3 + \frac{8}{3}c_3c_3'f \\ E_7 &= \frac{1 - c_2 + 1.5c_2c_2'f}{c_1 + 1.5c_1'f} \\ E_8 &= \frac{1 - c_3 + 1.5c_3c_3'f}{c_1 + 1.5c_1'f} \\ E_9 &= 1 - c_{3T} + c_{3T}c_{3T}'f \\ E_{10} &= \frac{1}{R} \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

Nessa aproximação, os gradientes horizontais de velocidade e temperatura são desprezados porque a ordem de grandeza de seus termos é menor que aquela dos gradientes verticais. Também, os divergentes horizontais dos fluxos turbulentos são negligenciados. Pela continuidade, a velocidade média vertical (w) é ignorada.

Todas essas equações (A.26 a A.35) podem ser reduzidas a expressões algébricas para cada fluxo turbulento. As equações resultantes para $\overline{u'w'}$, $\overline{w'\theta'}$ podem ser escritas na forma de

viscosidade e difusividade turbulenta das equações (2.41) e (2.42) mediante algum algebrismo (Yamada, 1977). Dessas relações, os coeficientes de proporcionalidade C_m e C_h podem ser expressos como funções da dinâmica do escoamento e dos efeitos de empuxo, o que significa que esses parâmetros dependem da estratificação e da presença do solo. A viscosidade turbulenta vertical (K_m^z) e a difusividade térmica vertical (K_h^z) do modelo k- ϵ anisotrópico então são

$$K_m^z = C_m \frac{k^2}{\epsilon} \quad (A.37)$$

$$K_h^z = C_h \frac{k^2}{\epsilon} \quad (A.38)$$

C_m e C_h são calculados por

$$C_m = \frac{2}{3} \frac{(c_1 - 1)(E_7 - A G_H)}{E_4 + \frac{E_4 E_8}{C_{IT}} G_H - E_5 E_7 G_M + E_5 A G_H G_M} \quad (A.39)$$

$$C_h = \frac{2}{3} \frac{(c_1 - 1) + E_5 G_M C_m}{(c_{IT} + c'_{IT} f) E_4 + \left(\frac{2 E_4 E_9}{E_{10}} + E_6 \right) G_H} \quad (A.40)$$

onde

$$G_M = \left(\frac{k}{\epsilon} \right)^2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right] \quad (A.41)$$

$$G_H = g \beta \left(\frac{k}{\epsilon} \right)^2 \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (A.42)$$

$$A = \frac{E_6 E_7 + \frac{(1 - c_{2T}) E_4 E_8}{c_{1T}}}{(c_{1T} + c'_{1T} f) E_4 + \left(\frac{2 E_4 E_9}{E_{10}} + E_6 \right) G_H} \quad (A.43)$$

Referências Bibliográficas

- Abreu, M. G. **Previsores Sinótico-Meteorológicos para a Dispersão de Poluentes na Região da Grande São Paulo**. Dissertação de Mestrado. INPE, São José dos Campos, 1984
- Alam, M. K., Seinfeld, J. H. Solution of the Steady State, Three-Dimensional Atmospheric Diffusion Equation for the Sulfur Dioxide and Sulfate Dispersion from Point Sources. **Atmospheric Environment**, v. 15, n. 7, p. 1221-1225, 1981
- American Society of Mechanical Engineers. **Recommended Guide for the Prediction of the Dispersion of Airborne Effluents**, 2ª ed., ASME, New York, 1973
- American Meteorological Society Workshop on Stability Classification Schemes and Sigma Curves - Summary of Recommendations. **Bulletin of the American Meteorological Society**, v. 58, p. 1305-1309, 1977
- Andrén, A. A Combined First-Order Closure / Gaussian Dispersion Model. **Atmospheric Environment**, v. 21, p. 1045-1058, 1987
- Andrén, A. **Application of the MIUU Meso- γ -Scale Model to the Öresund Meteorological Databank**. Report no. 87. Department of Meteorology, Uppsala University, 1989
- Andrén, A. A Meso-Scale Plume Dispersion Model. Preliminary Evaluation in a Heterogeneous Area. **Atmospheric Environment**, v. 24A, n. 4, p. 883-896, 1990
- Andretta, M., Bianconi, R., Flospergher, W., Tamponi, M. The MRBT Model: An Analytical Dispersion Model in a Finite Mixing Layer. Sensitivity Analysis and Validation Against Tracer Measurements. **Atmospheric Environment**, v. 27A, n. 11, p. 1665-1672, 1993
- Apsimon, H. M., Wilson, J. J. N. Modelling Atmospheric Dispersal of the Chernobyl Release Across Europe. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 41, p. 123-133, 1987
- Apsley, D. D. **Numerical Modelling of Neutral and Stably Stratified Flow and Dispersion In Complex Terrain**. Tese. Department of Mechanical Engineering, University of Surrey, 1995

- Apsley, D. D., Castro, I. P. Numerical Modelling of Flow and Dispersion Around Cinder Cone Butte. **Atmospheric Environment**, v. 31, p. 1059-1071, 1997
- Baron, T., Gerhard, E. R., Johnstone, H. F. Dissemination of Aerosol Particles Dispersed from Stacks. **Ind. & Eng. Chem.**, v. 41, p. 2403, 1949
- Bartzis, J. G., **ADREA-I A transient Three-Dimensional Transport Code for Atmospheric and Other Applications**. Some Preliminary Results. DEMO 85/3 "Demokritos", Aghia Paraskevi, Grécia, 1985
- Bartzis, J. G. Turbulent Diffusion Modelling for Wind Flow and Dispersion Analysis. **Atmospheric Environment**, v. 23, n. 9, p. 1963-1969, 1989
- Beljaars, A. C. M., Walmsley, J. L., Taylor, P. A. Modelling of Turbulence over Low Hills and Varying Surface Roughness. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 41, p. 203-215, 1987
- Benoit, R. On the Integral of the Surface Layer Profile-Gradient Functions. **J. of Applied Meteorology**, v. 16, p. 859-860, 1977
- Bezerra, S. R. **Determinação de Dióxido de Enxofre Atmosférico com Análise por Injeção**. Dissertação de Mestrado. Instituto de Química, Universidade de São Paulo, 1991
- Blackadar, A. K., Tennekes, H. Asymptotic Similarity in Neutral Barotropic Planetary Boundary Layers. **J. of Atmospheric Sciences**, v. 25, p. 1015-1020, 1968
- Blondin, C. Meteorology of Medium Range Transport of Pollutants. **Atmospheric Environment**, v. 18, n. 3, p. 537-544, 1984
- Boçon, F. T. e Maliska, C. R. Estudo Sobre a Simulação Numérica do Escoamento de um Jato Laminar. **Anais do V Encontro Nacional de Ciências Térmicas**, ABCM, São Paulo, p. 339-342, 1994
- Boçon, F. T. Modelagem Matemática do Escoamento e da Dispersão de Poluentes na Microescala Atmosférica. **Anales de la V Jornada de Investigación**, Asociación de Universidades del Grupo Montevideo, San Bernardino, Paraguai, p. 131, 1997

- Boçon, F. T. e Maliska, C. R. Numerical Modelling of Flow Over Complex Terrain. **Anais do XVIII Congresso Ibero Latino-Americano de Métodos Computacionais em Engenharia**, Brasília - DF, publicado em CD-ROM, 1997
- Boçon, F. T. e Maliska, C. R. Numerical Modelling of Flow and Dispersion Over Complex Terrain. **Anais do XIV Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, ABCM, Bauru-SP, p. 211-218, 1997
- Bosanquet, C. H., Pearson, J. L. The Spread of Smoke and Gases from Chimneys. **Trans. Faraday Society**, v. 32, p.1249, 1936
- Boussinesq, J. **Théorie de l'écoulement tourbillant**. Mem. Pre. par. div. Sav. v. 23, Paris, 1877
- Boybeyi, Z. **A Mesoscale Atmospheric Dispersion Modelling System for Simulations of Topographically Induced Atmospheric Flow and Air Pollution Dispersion**. Ph. D. Thesis, North Carolina State University, 1993
- Branco, S. M. **Efeitos Ambientais e Tratamento dos Efluentes Líquidos e Gasosos de uma Indústria de Fertilizantes Fosforados**. Dissertação de Mestrado. Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, 1991
- Briggs, G. A. Plume Rise. **U.S. Atomic Energy Commission Critical Review Series T/D 25075**, 1969
- Briggs, G. A. Some Recent Analyses of Plume Rise Observations. **Proc. of the 2nd International Clean Air Congress**, Academic Press, New York, p. 1029-1032, 1971
- Briggs, G. A. Diffusion Estimation for Small Emissions. **Atmospheric Turbulence and Diffusion Laboratory 1973 Annual Report**, USAEC Rep ATDL-106 Natl. Oceanic Admin., Washington, D.C., 1974
- Brock, F. V., Hewson, E. W. Analog Computing Techniques Applied to Atmospheric Diffusion - Continuous Point Source. **J. of Applied Meteorology**, v.2, n. 1, p.129-144, fev. 1963
- Bruin, H. A. R., Holtslag, A. A. M. A Simple Parameterization of the Surface Fluxes of Sensible and Latent Heat During Daytime Compared with the Penman-Monteith Concept. **J. of Applied Meteorology**, v. 21, n. 11, p. 1610-1621, 1982

- Businger, J. A., Arya, S. P. S. Height of the Mixed Layer in the Stably Stratified Planetary Boundary Layer. **Advances in Geophysics**, v. 18A, p. 73-92, 1974
- Byrne, A., Hatton, P., Marriot, P. Turbulent Flow in the Entrance Region of a Parallel Wall Passage. **Proc. of the Institute of Mechanical Engineering**, v. 184, p. 897, 1970
- Carmichael, G. R. Numerical Technique for the Investigation of the Transport and Dry Deposition of Chemically Reactive Plumes, **Atmospheric Environment**, v. 14, n. 12, p. 1433-1438, 1980
- Carmichael, G. R., Peters, L. K., Kitada, T. A Second Generation Model for Regional-Scale Transport / Chemistry / Deposition. **Atmospheric Environment**, v. 20, n. 1, p. 173-188, 1986
- Carvalho, P. G. M. **Meio Ambiente e Políticas Públicas: A Atuação da FEEMA no Controle da Poluição Ambiental**. Dissertação de Mestrado. Instituto de Economia, Universidade Estadual de Campinas, 1987
- Castro, I. P., Apsley, D. D. Flow and Dispersion Over Topography: A Comparison Between Numerical and Laboratory Data For Two-Dimensional Flows. **Atmospheric Environment**, v. 31, p. 839-850, 1997
- Celik, I., Rodi, W. Simulation of Free-Surface Effects in Turbulent Channel Flows. **Journal of Physico-Chemical Hydrodynamics**, v. 5, p. 217-231, 1984
- Chan, W. H., Chung, D. H. S. Regional-Scale Precipitation Scavenging of SO_2 , SO_4 , NO_3 and HNO_3 . **Atmospheric Environment**, v. 20, n. 7, p. 1397-1402, 1986
- Chang, J. S., Brost, R., Isaksen, I., Mandranich, S., Middleton, P., Stockwell, W., Waleck, C. A Three Dimensional Eulerian Acid Deposition Model: Physical Concepts and Formulation. **J. of Geophysic Research**, v. 92, p. 14681-14700, 1988
- Davis, C. G., Bunker, S. S., Mutschlecner, J. P. Atmospheric Transport Models for Complex Terrain. **J. of Climate and Applied Meteorology**, v. 23, p. 235-238, fev. 1984
- Dawson, P. J. A Numerical Model to Simulate the Atmospheric Transport and Diffusion of Pollutants over Complex Terrain. Ph. D. Thesis. Washington State University, 1987

- Degrazia, G. A. **Dispersão Lateral de Poluentes na Baixa Atmosfera**. Dissertação de Mestrado. Curso de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1983
- Dihlmann, A., Maliska, C. R., Silva, A. F. C., , Solução Numérica da Descarga de Jatos Poluentes em Meio Estratificado. **Anais do X Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, ABCM, Rio de Janeiro-RJ, p. 101-104, 1989
- Dihlmann, A. **Simulação Numérica da Descarga Térmica de Chaminés em Ambiente Uniforme e Estratificado**. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, 1992
- Dongmann, G., Nguyen, V. D., Valenta, P. Application of a Simple Sector Dispersion Model I. Determination of Washout Rate Constants of Heavy Metals from Wet Deposition Data. **The Science of the Total Environment**, v. 60, p. 213-228, 1987
- Doran, J. C., Horst, T. W., Nickola, P. W. Experiment Observations of the Dependence of Lateral and Vertical Dispersion Characteristics on Source Height. **Atmospheric Environment**, v. 12, p. 2259-2263, 1978
- Duynkerke, P. G. Application of the E- ϵ Turbulence Closure Model to the Neutral an Stable Atmospheric Boundary Layer. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v. 45, n. 5, 1988
- Eppel, D., Häuser, J., Lohse, H., Tanzer, F. Pollutant Dispersion in the Ekman Layer Using Moment-Reduced Transport Equations. Em **Air Pollution Modelling and its Application II**, ed. por de Wispelaere C., p. 437-450, Plenum, New York, 1983
- Eppel, D. P., Petersen, G., Misra, P. K., Bloxam, R. A Numerical Model for Simulating Pollutant Transport from a Single Point Source. **Atmospheric Environment**, v. 25A, n. 7, p. 1391-1401, 1991
- Fackrell, J. E., Robins, A. G. Concentration Fluctuations and Fluxes in Plumes from a Point Source in a Turbulent Boundary-Layer. **J. of Fluid Mechanics**, v. 117, p. 1-26, 1982
- Fernicola, N. A. G. G., Azevedo, F. A. **Estudo Toxicológico dos Principais Poluentes Ambientais**. São Paulo, 1980

- Fisher, B. E. A., Smith, R. Expanding Box Models for the Long-Range Transport of Chemically Reacting Airborne Material. **Atmospheric Environment**, v. 21, n. 1, p. 195-199, 1987
- Frenkiel, F. N. Application of the Statistical Theory of Turbulent Diffusion to Micrometeorology. **J. of Meteorology**, v. 9, p. 252, 1952
- Garret, A. J., Smith, F. G. Two-Dimensional Simulations of Drainage Winds and Diffusion Compared to Observations. **J. of Climate and Applied Meteorology**, v. 23, p. 597-610, 1984
- Gibson, M. M., Launder B. E. Ground Effects on Pressure Fluctuations in the Atmospheric Boundary Layer, **Journal of Fluid Mechanics**, v. 86, n. 3, p. 491-511, 1978
- Gifford, F. A. Use of Routine Meteorological Observations for Estimating Atmospheric Dispersion. **Nuclear Safety**, 2, p. 47-51, 1961
- Gifford, F. A. Turbulent Diffusion-Typing Schemes: A Review. **Nuclear Safety**, 17, p. 68-86, 1976
- Giovannoni, J. M. A Laboratory Analysis of Free Convection Enhanced by a Heat Island in a Calm and Stratified Environment. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 41, p. 9-26, 1987
- Golder, D. Relations among Stability Parameters in the Surface Layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 3, p. 47-58, 1972
- Gross, G. An Explanation of the Maloja-Serpent by Numerical Simulation. **Beitr. Phys. Atmosph.**, v. 58, p. 441, 1986
- Gryning, S. E., Lyck, E. Atmospheric Dispersion from Elevated Sources in an Urban Area. **J. of Climate and Applied Meteorology**, v. 23, n. 4, p. 651-660, 1984
- Hanna, S. R., Briggs, G. A., Hosker, R. P. **Handbook on Atmospheric Diffusion**, U.S. Dept. of Energy report DOE/TIC-11223, Washington, DC, 1982
- Hanna, S. R., Chang, J. C. Development of an Urban Dispersion Model and its Evaluation Using Indianapolis Data. **Proc. of the 82nd A&WMA Annual Meeting**, Anaheim, CA, USA, jun. 1989

- Hauguel, A. Numerical Modelling of Complex Industrial and Environment Flows, **2nd Int. Symposium on Refined Modelling of Flows**, Iowa City, Iowa, USA, set. 1985
- Hewson, E. W. The Meteorological Control of Atmospheric Pollution by Heavy Industry. **Quart. J. Royal Meteorological Society**, v. 71, p. 266, 1945
- Hickmann, A. J., Colwill, D. M. **Estimation of Air Pollution Concentration**. TRRL Laboratory Report 1052, 1982
- Huang, C. H. Theory of Dispersion in Turbulent Shear Flow. **Atmospheric Environment**, v. 13, p. 453-463, 1979
- Jakeman, A. J., Simpson, R. W., Taylor, J. A. Simulation Approach to Asses Air Pollution from Road Transport. **J. A. IEEE Transactions of Systems, Man and Cybernetics V. SMC-14**, n. 5, p.726-736, 1984
- Kerr, A. A. F. S. **Caracterização Física do Aerossol Atmosférico de Cubatão e uma Experiência de Aplicação de Modelo de Dispersão por Pluma Gaussiana**. Tese. Instituto de Física, Universidade de São Paulo, 1983
- Kitabayashi, K. Wind Tunnel Simulation of Air Flow and Pollutant Diffusion Over Complex Terrain. **Atmospheric Environment**, v. 25A, n. 7, p.1155-1161, 1991
- Kitada, T., Carmichael, G. R., Peters, L. K. Numerical Simulation of the Transport of Chemically Reactive Species under Land- and Sea-Breeze Circulations, **J. of Climate and Applied Meteorology**, v. 23, n. 8, p. 1153-1172, ago. 1984
- Kitada, T. Turbulence Structure of Sea Breeze Front and its Implication in Air Pollution Transport - Application of k- ϵ Turbulence Model. **Boundary-Layer Meteorology**, v.41, p.217-239, 1987
- Kitada, T., Kitagawa, E. Numerical Analysis of the Role of Sea Breeze Fronts on Air Quality in Coastal and Inland Polluted Areas. **Atmospheric Environment**, v. 24A, n. 6, p. 1545-1559, 1990
- Klug, W. A Method for Determining Diffusion Conditions from Synoptic Observations. **Staub-Reinhalt. Luft**, v. 29, p. 14-20, 1969

- Kobayashi, M. H., Pereira, J. C. F., Siqueira, M. B. B. Estudo Numérico de Escoamentos Turbulentos Sobre e Através de um Modelo de Florestas em Montanhas. **XII Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, Brasília, p. 1085-1088, 1993
- Koo, Y. S. **Pollutant Transport in Buoyancy Driven Atmospheric Flows**. Ph. D. Thesis. The Louisiana State University and Agricultural and Mechanical Col., 1993
- Kostryukov, A. A., Novitskii, M. A. Numerical Modelling of Pollutant Distribution under Conditions of Breeze Circulation, **Soviet Meteorology and Hydrology**, n. 6, p. 27-33, 1986
- Lamb, R. G., Chen, W. H., Seinfeld, J. H. Numeric-Empirical Analyses of Atmospheric Diffusion Theories. **J. of Atmospheric Sciences**, v. 32, p. 1794-1807, 1975
- Lamb, R. G., Duran, D. R. Eddy Diffusivities Derived from a Numerical Model of the Convective Boundary Layer. **Nuovo Cimento**, 1C, p. 1-17, 1977
- Lamb, R. G. Numerical Simulation of Dispersion from an Elevated Point Source in the Convective Planetary Boundary Layer. **Atmospheric Environment**, v. 12, n. 6-7, p. 1297-1304, 1978
- Lamb, R. G. **A Regional Scale (1000 km) Model of Photochemical Air Pollution. Part 3: Tests of the Numerical Algorithms**. Office of Research and Development, Environmental Sciences Research Laboratory, U.S., EPA, Research Triangle Park, NC, 1985
- Lange, R. ADPIC - A Three-Dimensional Particle-in-Cell Model for the Dispersal of Atmospheric Pollutants and its Comparison to Regional Tracer Studies. **J. of Applied Meteorology**, v. 17, p. 320-329, 1978
- Lantz, R. B. Use of 3D Numerical Air Pollution Models in Planning Plant Location, Design and Operation. **Canadian Petroleum Technology**, v. 11, n. 3, 1972
- Launder, B. E., Spalding, D. B. **Mathematical Models of Turbulence**. Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science and Technology, Academic Press, Londres, 1972

- Launder, B. E, Spalding, D. B. The Numerical Computation of Turbulent Flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 3, p. 269-289, 1974
- Lee, H. N. Finite Element Numerical Study of Atmospheric Turbulent Motion and Diffusion in the Planetary Boundary Layer. **Proc. of the Int. Conf. in Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow**, John Wiley and Sons (Halsted Press), New York, p. 781-791, jul. 1978
- Lee, H. N. Three-Dimensional Analytical Models Suitable for Gaseous and Particulate Pollutant Transport, Diffusion, Transformation and Removal. **Atmospheric Environment**, v. 19, n. 11, p. 1951-1957, 1985
- Lee, C. B. Simple Model and Climatological Aspects of the Structure of the Convective Boundary Layer. **Atmospheric Environment**, v. 20, n. 4, p. 705-714, 1986
- Leonard, B. P. A Stable and Accurate Convective Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation. **Comput. Methods Appl. Mech. Eng.**, v. 19, p. 59, 1979
- Lien, F. S., Leschziner M. A. Upstream Monotonic Interpolation for Scalar Transport with Application to Complex Turbulent Flows. **Int. Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 19, p. 527-548, 1994
- Llewellyn, R. P. An Analytical Model for the Transport, Dispersion and Elimination of Air Pollutants Emitted from a Point Source. **Atmospheric Environment**, v. 17, n. 2, p. 249-256, 1983
- Lott, R. A. Case Study of Plume Dispersion over Elevated Terrain. **Atmospheric Environment**, v. 18, p. 125-134, 1984
- Maliska, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. Livros Técnicos e Científicos, Rio de Janeiro, 1995
- Marchi, C. H. **Solução Numérica de Escoamentos Tridimensionais Viscosos em Qualquer Regime de Velocidade**. Dissertação. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFSC, 1992

- Marchi, C. H., Maliska, C. R. A Nonorthogonal Finite Volume Method for the Solution of All Speed Flows Using Co-located Variables. **Numerical Heat Transfer, Part B**, v. 26, n. 3, p. 293-311, 1994
- Marshall, J. S., Palmer, M. W. M. The Distribution of Raindrops with Size. **J. of Meteorology**, v. 5, p. 165-166, 1948
- McMahon, T. A., Denison, P. J. Empirical Atmospheric Deposition Parameters - A Survey. **Atmospheric Environment**, v. 13, n. 5, p. 571-585, 1979
- McNider, R. T., Pielke, R. A. Numerical Simulation of Slope and Mountain Flows. **J. of Climate and Applied Meteorology**, v. 23, n. 10, p. 1441-1453, out. 1984
- McRae, G. J., Goodin, W. R., Seinfeld, J. H. Development of a 2nd Generation Mathematical Model for Urban Air Pollution - 1. Model Formulation. **Atmospheric Environment**, v. 14, n. 4, p. 679-696, 1982
- Melbourne, W. H. Wind Tunnel Modelling of Buoyant Chimney Plumes. **Proc. of the 3rd Australasian Conference on Hydraulics & Fluid Mechanics**, p81-85, nov. 1968
- Mellor, G.L., Yamada, T. Development of a Turbulence Closure Model for Geophysical Fluid Problems, **Reviews of Geophysics and Space Physics**, vol. 20, no 4, p. 851-875, 1982
- Meroney, R. N. Fluid Dynamics of Flow Over Hills / Mountains- Insights Obtained Through Physical Modeling. Chapter 7 in **Atmospheric Processes Over Complex Terrain. Meteorological Monographs**, v. 23, p.145-171, 1990
- Mersden, A. R. Jr., Frenklach, M. Reible, D. D. Increasing the Computational Feasibility of Urban Air Quality Models that Employ Complex Chemical Mechanisms, **JAPCA**, V. 37, N. 4, P. 370-376, abr. 1987
- Mikkelsen, T., Larsen, S. E., Thykier-Nielsen, S. Description of the Risø Puff Diffusion Model. **Nuclear Technology**, v. 67, p. 56-65, 1984
- Miyamaru, M. **Aplicação do Método de Análise por Ativação à Determinação de Poluentes Atmosféricos**. Dissertação de Mestrado. Instituto de Química, Universidade de São Paulo, 1990

- Müller, J. Deposition Velocities of Particulate Substances on Different Surfaces. **J. of Aerosol Science**, v. 21, supp. 1, p. 197-199, 1990
- Myrup, L. O., Ranzieri, A. J. **A Consistent Scheme for Estimating Diffusivities to be Used in Air Quality Models**. Rep. CA-DOT-TL-7169-3-76-32, California Department of Transportation, Sacramento, 1976
- NAVIER - **Desenvolvimento de Códigos Computacionais para Solução de Problemas de Escoamentos de Alta Velocidade** - Relatório preparado para o Instituto de Atividades Espaciais do Centro Técnico Aeroespacial - UFSC - Dep. Eng. Mecânica - Parte VII , 1991
- O'Brien, J. On the Vertical Structure of the Eddy Exchange Coefficient in the Planetary Boundary Layer. **J. of Atmospheric Sciences**, v. 27, p. 1213-1215, 1970
- O'Dell, R. A., Taheri, M., Kabel, R. L. A Model for Uptake of Pollutants by Vegetation. **J. of the Air Pollution Control Association**, v. 27, n. 11 p. 1104-1109, 1977
- Ohba, R. , Ukeguchi, N. , Kakishima, S. , Lamb, B. Wind Tunnel Experiment of Gas Diffusion in Stably Stratified Flow Over a Complex Terrain. **Atmospheric Environment**, v. 24A, n. 8, p. 1987-2001, 1990
- Orgill, M. M., Cermak, J. E., Grant, L. O. **Laboratory Simulation and Field Estimates of Atmospheric Transport-Dispersion Over Mountainous Terrain**. Colorado State University Report CER 70-71 MMO-JEC-LOG40, 302 pp., 1971
- Ozoe, H., Shibata, T., Sayama, H., Ueda, H. Characteristics of Air Pollution in the Presence of Land and Sea Breeze, **Atmospheric Environment**, v. 17, n. 1, p. 35-42, 1983
- Pai, P. P. **Parallel Computation of Air Pollution Using a Second-Order Closure Model**. Ph. D. Thesis. University of Kentucky, 1991
- Panofsky, H. A., Dutton, J. A. **Atmospheric Turbulence - Models and Methods for Engineering Applications**, John Wiley & Sons, New York, 1984
- Pasquill, F. The Estimation of the Dispersion of Windborne Material. **Meteorological Magazine**, v. 90, p. 33-49, 1961

- Pasquill, F. **Atmospheric Diffusion**. D. Van Nostrand Company Ltd. Princeton, New Jersey, 1962
- Patankar, S. V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Hemisphere Publishing Corporation. 1980
- Peaceman, D. W., Rachford, H. H. The Numerical Solution of Parabolic and Elliptic Differential Equations. **SIAM Journal**, v. 3, p. 28-41, 1955
- Peric, C. M., Kessler, R., Scheuerer, G. Comparison of Finite-Volume Numerical Methods with Staggered and Collocated Grids. **Computers and Fluids**, v. 16, p. 389-403, 1988
- Perry, S. G. CTDMPPLUS: A Dispersion Model for Sources Near Complex Topography. Part II. Technical Formulations. **Journal of Applied Meteorology**, v. 31, p. 633-660, 1992
- Petersen, R. L., Ratcliff, M.A. SLAB/DEGADIS Model Prediction Versus Wind Tunnel Observations for Homogeneous and Heterogeneous Roughness. **Proc. of the 82nd A&WMA Annual Meeting**, Anaheim, CA, USA, jun. 1989
- Raithby, G. D., Stubley, G. D., Taylor, P. A. The Askervein Hill Project: A Finite Control Volume Prediction of Three-Dimensional Flows over the Hill. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 39, p. 247-267, 1987
- Rayner, K. N., Watson, I. D. Operational Prediction of Daytime Mixed Layer Heights for Dispersion Modelling. **Atmospheric Environment**, v. 25A, n. 8, p. 1427-1436, 1991
- Richardson, L. F., Proctor, D. Diffusion Over Distances Ranging from 3 km to 86 km. **Memoirs of the Royal Meteorological Society**, v. 1, n. 1, 1925
- Richardson, L. F. Atmospheric Diffusion Shown on a Distance-Neighbor Graph, **Proc. of Royal Society, A**, v. 110, p.709, 1926
- Riopelle, G., Stubley, G. D., Strong, A. B. Numerical Study of the Influence of the Ambient Pressure Field on Free Plane Turbulent Vertical Jets and Plumes. **Numerical Heat Transfer**, Part A, v. 26, p. 273-286, 1994
- Roache, P. J. Perspective: A Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies. **Journal of Fluids Engineering**, v. 116, p. 405-413, 1994

- Rodi, W. **Turbulence Models and Their Application in Hydraulics**, IAHR, Section on Fundamentals of Experimental and Mathematical Fluid Dynamics, Netherlands, 1980
- Rodi, W. Calculation of Stably Stratified Shear-Layer Flows with a Buoyancy-Extended $k-\epsilon$ Turbulence Model. **Turbulence and Diffusion in Stable Environments**, J. C. R. Hunt, Clarendon Press, Oxford, p. 111-143, 1985
- Rossby, C. G. A Generalization of the Theory of the Mixing Length With Applications to Atmospheric and Oceanic Turbulence. **Massachusetts Institute of Technology Meteorological Papers**, v. 1, n. 4, 1932
- Runca, E. Numerical Treatment of Time Dependent Advection and Diffusion of Air Pollutants. **Atmospheric Environment**, v. 9, n. 1, p. 69-80, jan. 1975
- Runca, E., Melli, P., Spirito, A. Real-Time Forecast of Air Pollution Episodes in the Venetian Region. Part 1: The Advection-Diffusion Model. **Applied Mathematical Modelling**, v. 3, p. 402-408, dez. 1979
- Sabbag, O. **Poluição Atmosférica: Agentes Polucionais, Seus Efeitos e Controle**. Tese. Universidade Federal do Paraná, 1978
- Santos, J. M. **Simulação Numérica Tridimensional da Dispersão de Poluentes na Atmosfera**. Dissertação de Mestrado. Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 1992a
- Santos, J. M., Nieckele, A. O., Azevedo, L. F. A. Dispersão de Contaminantes na Atmosfera: Modelagem Através da Solução Numérica das Equações Fundamentais de Transporte. **IV Encontro Nacional de Ciências Térmicas**, ABCM, Rio de Janeiro, p. 419-422, 1992b
- Santos, J. M., Nieckele, A. O., Azevedo, L. F. A. Efeitos da Velocidade Terminal na Dispersão de Partículas na Atmosfera. **XII Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, Brasília, p. 1069-1071, 1993
- Schatzman, M., König, G., Lohmeyer, O. A. Wind Tunnel Modelling of Small-Scale Meteorological. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 41, p241, 1987

- Scheffe, R. D., Morris, R. E. Review of the Development and Application of the Urban Airshed Model, **Atmospheric Environment**, v. 27B, n. 1, mar. 1993
- Schumann, T. Large Discrepancies Between Theoretical and Field-Determined Scavenging Coefficients. **J. of Aerosol Science**, v. 20, n. 8, p. 1159-1162, 1989
- Sedefian, L., Bennett, E. A Comparison of Turbulence Classification Schemes. **Atmospheric Environment**, v. 14, p. 741-750, 1980
- Seigneur, C. Understand the Basics of Air-Quality Modelling. **Chemical Engineering Progress**, v. 88, n. 3, p. 68-74, mar. 1992
- Seinfeld, J. H. **Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution**. John Wiley & Sons. New York, USA, 1986
- Sherman, C. A. A Mass-Consistent Model for Wind Fields over Complex Terrain. **J. of Applied Meteorology**, v.17, p. 312-318, 1978
- Shin, W. C. **Comprehensive Air Pollution Modeling on Multiprocessing Environments; Application to Regional Scale Problems**. Ph. D. Thesis. The University of Iowa, 1990
- Shin, W. C., Carmichael, G. R. Comprehensive Air Pollution Modeling on a Multiprocessor System. **Computers and Chemical Engineering**, v. 16, n. 8, p. 805-815, 1992
- Shir, C. C. Pilot Study in Numerical Techniques for Predicting Air Pollutant Distribution Downwind from a Line Stack. **Atmospheric Environment**, v. 4, n. 4, p. 387-407, jul. 1970
- Silva, A. F. C., Marchi, C. H., Livramento, M. A., Azevedo, J. L. F. On the Effects of Vectorization for Efficient Computation of Three Dimensional Segregated Finite Volume Solutions. **XI Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, São Paulo, p. 109-112, 1993
- Snyder, W. H. Similarity Criteria for the Application of Fluid Models to the Study of Air Pollution Meteorology. **Boundary Layer Meteorology**, v. 3, p. 112-134, 1972

- Snyder, W. H., Thompson, R. S., Eskridge, R. E., Lawson, R. E., Castro, I. P., Lee, J. T., Hunt, J. C. R., Ogawa, Y. The Structure of Strongly Stratified Flow Over Hills: Dividing Streamline Concept. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 152, p. 249-288, 1985
- Snyder, W. H., Khurshudyan, L. H., Nekrasov, I. V., Lawson, R. E., Thompson, R. S. Flow and Dispersion of Pollutants Within Two Dimensional Valleys. **Atmospheric Environment**, v. 25A, n. 7, p. 1347-1375, 1991
- Stephenson, P. L. A Study of Heat Transfer in Two-Dimensional Turbulent Flow in a Circular Pipe and Between Parallel and Diverging Plates. **Int. Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 19, p. 413-423, 1976
- Stern, A. C. **Air Pollution**. vol. 1, 2^a ed., Academic Press, 1968
- Stull, R. B. Integral Scales for the Nocturnal Boundary Layer. Part 1: Empirical Depth Relationships. **J. of Climate and Applied Meteorology**, v. 22, n. 4, p. 673-686, abr. 1983
- Stull, R. B. **An Introduction to Boundary Layer Meteorology**. Kluwer Academic Publishers. 1986
- Sutton, O. G. A Theory of Eddy Diffusion in the Atmosphere. **Proc. of Royal Society, A**, v. 135, p. 143, 1932
- Sutton, O. G. The Problem of Diffusion in the Lower Atmosphere. **Quart. F. R. Meteorological Society**, v. 73, p. 257, 1947
- Sutton, O. G. The Theoretical Distribution of Airborne Pollution from Factory Chimneys. **Quart. J. Royal Meteorological Society**, v. 73, p. 426, 1947
- Sutton, O. G. The Dispersion of Hot Gases in the Atmosphere. **J. of Meteorology**, v. 7, p. 307, 1950
- Svensson, V., Häggkvist, K. A Two Equation Turbulent Model for Canopy Flows. **J. of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v. 35, p. 201-211, 1990
- Sykes, R. I., Henn, D. S. Large-Eddy Simulation of Concentration Fluctuations in a Dispersing Plume. **Atmospheric Environment**, v. 26A, n. 17, p. 3127-3144, 1992

- Sykes, R. I., Henn, D. S., Parker, S. F., Lewellen, W. S. Large-Eddy Simulation of a Turbulent Reactive Plume. **Atmospheric Environment**, v. 26A, n. 14, p. 2565-2574, 1992
- Taylor, G. I. Diffusion by Continuous Movements. **Proc. London Math. Soc.**, v. 20, n. 196, 1921
- Taylor, G. I. Reprinted in the **Scientific Papers of Sir Geoffrey Ingram Taylor**, G. K. Batchelor, Ed., London: Cambridge Univ. Press, 1960
- Taylor, P. A., Teunissen, H. W. Askervein '82: Report on the September / October 1982 Experiment to Study Boundary Layer Flow over Askervein, South Uist, Report MSRB-83-8. Atmospheric Environment Service, Downsview, Ontario, Canada, 1983
- Taylor, P. A., Teunissen, H. W. The Askervein Hill Project: Report on the September / October 1983 Main Field Experiment, Report MSRB-84-6. Atmospheric Environment Service, Downsview, Ontario, Canada, 1985
- Taylor, P. A., Teunissen, H. W. The Askervein Hill Project: Overview and Background Data. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 39, 1987
- Teunissen, H. W. Wind Tunnel and Full Scale Comparison of Mean Wind Flow Over an Isolated Low Hill. **J Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v. 15, n. 1-3, p. 271-286, dez. 1983
- Tirabassi, T., Tagliazucca, M., Zannetti, P. KAPPA-G, a Non-Gaussian Plume Dispersion Model: Description and Evaluation Against Tracer Measurements. **J. of the Air Pollution Control Association**, v. 36, n. 5, p. 592-596, 1986
- Thompson, J. F., Mastin, C. W. Order of Difference Expressions in Curvilinear Coordinates Systems. **Journal of Fluids Engineering**, v. 107, p. 241-250, 1985
- Tirabassi, T. Analytical Air Pollution Advection and Diffusion Models. **Water, Air, and Soil Pollution**, v. 47, p. 19-24, 1989
- Truppi, E. L., Holzworth, G. C. **EPA Complex Terrain Model Development - Description of a Computer Data Base from Small Hill Impaction Study No. 1 - Cinder Cone Butte, Idaho**. EPA-600/3-84-038, february 1984

- Van Doormal, J. P., Raithby, G. D. Enhancements of the Simple Method for Predicting Incompressible Fluid Flows. **Numerical Heat Transfer**, v. 77, p. 147-163, 1984
- Van Dop, H., De Haan, B. J., Engeldal, C. The KNMI Mesoscale Air Pollution Model. Scientific Reports, KNMI, WR 82-6, 1982
- Vasconcellos, J. F. V. **Simulação Numérica de Escoamento Turbulento em Bifurcação Usando Multidomínios**. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal de Santa Catarina, 1993
- Vasconcellos, J. F. V., Maliska, C. R. Numerical Study of the Turbulent Flow in a Bifurcating Channel Using a Multidomain Procedure. **Anais do V Encontro Nacional de Ciências Térmicas**, ABCM, p. 109-112, São Paulo - SP, 1994
- Venkatram, A., Karamchandani, P. K., Misra, P. K. Testing a Comprehensive Acid Deposition Model. **Atmospheric Environment**, v. 22, n. 4, p. 737-747, 1988
- Verver, G. H. L., De Leeuw, F. A. A. M. An Operational Puff Dispersion Model. **Atmospheric Environment**, v. 26A, n. 17, p. 3179-3193, 1992
- Voldner, E. C., Sirois, A. Monthly Mean Spatial Variations of Dry Deposition Velocities of Oxides of Sulphur and Nitrogen. **Water, Air and Soil Pollution**, v. 30, n. 1-2, p. 179-186, 1986
- Waterfield, V. H., Hickmann, A. J. Estimating Air Pollution from Road Traffic - A Graphical Screening Method. TRRL Laboratory Suppl. Report 752, 1982
- Weber, A. H. Atmospheric Dispersion Parameters in Gaussian Plume Modelling. **EPA-600/4-76-030A**, U.S. Environmental Protection Agency, Washington, D.C., 1976
- Wesely, M. L. Parameterization of Surface Resistances to Gaseous Dry Deposition in Regional-Scale Numerical Models. **Atmospheric Environment**, v. 23, n. 6, p. 1293-1304, 1989
- Yamada, T. A Numerical Experiment on Pollutant Dispersion in a Horizontally-Homogeneous Atmospheric Boundary Layer. **Atmospheric Environment**, v. 11, p. 1015-1024, 1977
- Yamada, T. Numerical Simulation of Airflows and SO₂ Concentration Distributions in an Arid South-Western Valley. **Atmospheric Environment**, v. 26A, n. 9, p. 1771-1781, 1992

Yanenko, N. N., Marchuk, G. I. **The Application of Splitting-up Method (Fractional Steps) to Problems of Mathematical Physics**, excerpt from Some Problems of Numerical and Applied Mathematics, Novossibirsk, Nanka, 1966

Yeh, K. W. **Prediction of Regional Pollutant Dispersion Using a Nested-Grid, Three-Dimensional Numerical Model**. Ph. D. Thesis. The University of Utah, 1987

Zilitinkevich, S. S. On the Determination of the Height of the Ekman Boundary Layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 3, p. 141-145, 1972